

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZIKOS FAKULTETAS
KVANTINĖS ELEKTRONIKOS KATEDRA

Jonas Berzinš

**ŠVIOSOS SKLIDIMO PER
PERIODINES SUBBANGINES APERTŪRAS TYRIMAS**

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas
(studijų programa – LAZERINĖ TECHNOLOGIJA)

Studentas

Jonas Berzinš

Darbo vadovas

Dr. Bogdan Voisiat

Recenzentas

Doc. dr. Aidas Matijošius

Katedros vedėjas

Prof. habil. dr. Valdas Sirutkaitis

Vilnius 2016

Turinys

| | |
|---|----|
| Įvadas | 2 |
| 1. Literatūros apžvalga | 3 |
| 1.1. Elektromagnetinio lauko teorija | 3 |
| 1.2. <i>Drude-Lorentz</i> modelis..... | 5 |
| 1.3. Paviršiaus plazmonų poliaritonai..... | 9 |
| 1.4. Sustiprintas optinis pralaidumas (EOT) | 13 |
| 1.5. Pritaikymo perspektyvos | 15 |
| 1.6. Apertūrų formavimo technologijos | 16 |
| 1.6.1. Tiesioginis lazerinis interferencinis struktūrizavimas (DLIP)..... | 17 |
| 1.6.2. Lazerinių technologijų palyginimas | 19 |
| 2. Modeliavimo metodas ir priemonės | 22 |
| 2.1. Baigtinių elementų metodas | 22 |
| 2.2. <i>COMSOL Multiphysics</i> programinis paketas | 23 |
| 3. Modeliavimo rezultatai..... | 25 |
| 3.1. <i>Drude-Lorentz</i> modelio pritaikymas | 25 |
| 3.2. EOT ir įvairių parametrų įtaka..... | 28 |
| 3.2.1. Medžiagos pasirinkimas | 30 |
| 3.2.2. Apertūros geometrinių dydžių įtaka | 31 |
| 3.2.3. Apertūrų formos ir skylių kūgiškumo įtaka..... | 33 |
| 3.2.4. Priklausomybė nuo spinduliuotės kritimo kampo | 35 |
| 3.2.5. Aplinkos įtaka..... | 37 |
| 4. Eksperimentinė įranga ir medžiagos | 40 |
| 5. Eksperimentiniai rezultatai | 43 |
| 5.1. Interferencinio pažeidimo tolygumas | 43 |
| 5.2. Pažeidimų slenksčiai ir priklausomybė nuo impulsų skaičiaus..... | 45 |
| 5.3. Apertūrų pralaidumo matavimai..... | 50 |
| Pagrindiniai rezultatai ir išvados | 51 |
| Literatūros sąrašas | 52 |
| Santrauka | 57 |
| Summary | 58 |

Ivadas

Mokslas vystosi tokia sparta, kad dėl atrandamų naujų reiškinių anksčiau atrode išspręsti uždaviniai privalo būti sprendžiami iš naujo. Būtent taip yra ir su šiame darbe tiriamu šviesos sklidimu per metalines subbangines apertūras.

Šviesos sklidimas per apertūras, mažesnes nei elektromagnetinės spinduliuotės bangos ilgis, buvo intensyvi tyrimų sritis jau prieš gerą šimtmetį [1]. Ilgą laiką buvo remtasi difrakcijos teorija [2, 3] neįvertinant visų kitų vykstančių fizikinių procesų, kol 1998 m. *Thomas Ebbesen* su grupe paskatino naują požiūrį į šį fizikinį reiškinį. Jie pademonstravo sustiprintą optinį pralaidumą (angl. *extraordinary optical transmission* arba *enhanced optical transmission* (EOT)): metalinėje dangoje suformavus subbanginių apertūrų matricą, per ją praėjusi regimoji šviesa gali būti intensyvesnė nei kritusi į tos apertūros plotą [4-7]. Vienas esminių tai paaiškinančių mechanizmų yra plazmonai [8-10]. Nepaisant to, kad plazmonai (paviršiaus plazmonų poliaritonai ir lokalizuoti paviršiaus plazmonai) buvo apibūdinti dar dvidešimtojo amžiaus pradžioje, šiai dienai turime didžiulį mokslininkų polėkį įvairių naujų taikymų paieškoje [11]. Pastaruoju metu didelio susidomėjimo sulaukusi plazmonika priklauso nanofotonikos mokslo sričiai, bendru atžvilgiu tiriančiai elektromagnetinių laukų valdymą struktūromis mažesnėmis nei bangos ilgis. Šis valdymas paremtas elektromagnetinės spinduliuotės sąveika su metalo laidumo juostos elektronais, taip ties subbangine struktūra sustiprinant artimąjį optinį lauką [8]. Aptariamų periodinių subbanginių apertūrų pritaikymo perspektyvos yra itin plačios: dažniui selektyvūs paviršiai (filtrai) [12, 13], paviršiumi sustiprinta *Raman* sklaida [14], metalu sustiprinta fluorescencija [15-17] ir įvairių konfigūracijų jutikliai [18-21].

Fizinių ir technologijos mokslų centre, Lazerinio mikroapdirbimo laboratorijoje, sėkmingai vystomi techniniai sprendimai, leidžiantys formuoti periodines struktūras [22-24]. Atsižvelgiant į tai, pradėta iniciatyva formuoti periodines subbangines apertūras, veikiančias EOT režime (regimosios spinduliuotės spektro srityje), ir jas panaudoti kuriant jutiklius ar kitas technologijas.

Pagrindiniai šio darbo tikslai: subbanginių periodinių apertūrų pralaidumo modeliavimas baigtinių elementų metodu ir tokių struktūrų formavimas tiesioginės lazerinės interferencijos metodu. Darbo rezultatai siekti apskaičiuojant ir palyginant literatūroje pateiktų subbanginių periodinių apertūrų pralaidumo spektrus bei ištiriant įvairių subbanginių metalinių apertūrų parametrų įtaką pralaidumo spektrui. Taip pat tiesioginio lazerinio interferencinio struktūrizavimo metodu buvo siekiama suformuoti tokias 600 nm periodo subbangines struktūras bei išmatuoti jų pralaidumo spektrus.

1. Literatūros apžvalga

Pirmojoje literatūros apžvalgos dalyje prisiminsime klasikinę elektromagnetizmo teoriją, bus suformuluotas pagrindas metalų dielektrinės skvarbos funkcijos optimizavimui. Tolimesnėje dalyje apžvelgsime plazmonikos teorinį pagrindą, susipažinsime su paviršiaus plazmonų poliaritonais. Apžvalgoje taip pat bus pristatytas sustiprintas optinis pralaidumas (EOT) šviesai sklindant per periodines subbangines struktūras, bus apžvelgtos potencialios šio reiškinio panaudojimo galimybės bei detaliau pateiktos tokių apertūrų gamybos technologijos.

1.1. Elektromagnetinio lauko teorija

Maxwell lygtys (elektromagnetinio lauko teorija) – tai keturių dalinių diferencialinių lygčių sistema, naudojama visiems makroskopiniams elektromagnetiniams reiškiniams aprašyti [25]. Ši teorija gali būti taikoma ir subbanginėms struktūroms, nes, nepaisant sąlyginai mažų matmenų (nuo kelių šimtų iki keliasdešimt nanometrų), nagrinėjamos struktūros gerokai viršija atomų ar pavienių elementariųjų dalelių, krūvininkų matmenis. Diferencialinės formos *Maxwell* lygtys:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}, \quad (1.4)$$

čia \mathbf{D} , \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{B} ir \mathbf{J} žymi atitinkamai elektrinės indukcijos (slinkties), elektrinio lauko, magnetinio lauko, magnetinės indukcijos ir laisvųjų srovių vektorius, o ρ – laisvųjų krūvininkų tankį. Šių lygčių fizikinės prasmės yra tokios: pirmoji lygtis nurodo, kad elektrinės slinkties šaltiniai yra elektros krūviai, antroji lygtis apibrėžia tai, jog magnetinio lauko indukcija yra solenoidinė, tai yra priešingai nei elektrinio lauko atveju, magnetiniai krūviai neegzistuoja, trečioji parodo, kad laikinis magnetinės indukcijos kitimas kuria elektrinį lauką, o paskutinioji lygtis nusako tai, kad magnetinį lauką kuria tiek elektrinės slinkties laikinis kitimas, tiek elektros srovė [26].

Pasinaudodami šiomis lygtimis ir vektorinės algebros pagrindais, galime išreikšti elektromagnetinės bangos lygtį:

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} = \nabla \times \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right). \quad (1.5)$$

Atsižvelgiant į tai ir norint geriau suprasti elektromagnetinio lauko teorijos sąryšius, reikia prisiminti, kaip priklauso medžiagos tūrio vieneto elektrinis dipolinis momentas \mathbf{P} (poliarizuotumas) ir magnetinis dipolinis momentas \mathbf{M} atitinkamai nuo elektromagnetinės spinduliuotės elektrinio ir magnetinio lauko stiprio:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (1.6)$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} - \mathbf{M}, \quad (1.7)$$

čia ε_0 ir μ_0 vakuomo dielektrinė ir magnetinė skvarba. Minėti dipoliniai momentai gali būti aprašyti pasinaudojant jautriu, tai yra bedimensiniu daugikliu, atspindinčiu medžiagos tūrio vieneto dipolinio momento kitimą sistemą veikiant išoriniu elektriniu lauku. Izotropinėje terpėje šis daugiklis yra skaliaras [27]. Tokiu atveju dipoliniai momentai yra aprašomi taip:

$$\mathbf{P} = \varepsilon_0 \chi_e \mathbf{E}, \quad (1.8)$$

$$\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{E}. \quad (1.9)$$

Pasinaudojant šiomis priklausomybėmis galima atitinkamai pakeisti elektrinio lauko slinkties (1.6 lygtis) ir magnetinis lauko (1.7 lygtis) išraiškas:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0(1 + \chi_e) \mathbf{E} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (1.10)$$

$$\mathbf{B} = \mu_0(1 + \chi_m) \mathbf{H} = \mu \mathbf{H}. \quad (1.11)$$

Pagal šiuos elektrinio ir magnetinio lauko tarpusavio sąryšius ir žinant tai, jog laisvųjų srovių vektorių \mathbf{J} yra lygus medžiagos laidumo σ ir elektrinio lauko \mathbf{E} sandaugai, sėkmingai perrašome elektromagnetinės bangos lygtį:

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu\varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}, \quad (1.12)$$

pasikartojant, čia pateiktas σ yra medžiagos laidumas, o μ ir ε – magnetinė ir dielektrinė skvarbos.

Be to, analizuojant elektromagnetinių bangų sklidimą, remiamasi papildoma prielaida, kad elektrinis laukas laike kinta tam tikro dažnio ω harmoninės funkcijos pavidalu:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}. \quad (1.13)$$

Taip dar kartą galima perrašyti anksčiau pateiktą elektromagnetinės bangos 1.12 lygtį:

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \omega^2 \mu \hat{\varepsilon} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.14)$$

Ši lygtis žinoma, kaip *Helmholz* lygtis, o $\hat{\varepsilon}$ – tai kompleksinė dielektrinė skvarba (tolimesniuose skyriuose dėl paprastumo žymėsime tiesiog ε), kurios svarbą aiškinsimės ir priklausomybes tirsime kitame skyriuje.

1.2. *Drude-Lorentz* modelis

Žinios apie tam tikras optines medžiagų savybes yra kritinis aspektas vystant jų technologinius pritaikymus [28-31]. Dielektrinė skvarba yra dydis, išreiškiantis sąsają tarp optinių medžiagos parametrų ir fundamentinės prigimties (medžiagos vibracinių, elektroninių ir kitų savybių). Kitaip tariant, dielektrinė skvarba apibūdina medžiagos poveikį ja sklindančioms elektromagnetinėms bangoms. Bendruoju atveju tai yra kompleksinis dydis:

$$\varepsilon = \varepsilon' + \varepsilon'', \quad (1.15)$$

čia ε' – realioji dielektrinės skvarbos dalis, išreiškianti, kaip stipriai išorinis laukas poliarizuoja medžiagą, o ε'' – menamoji dalis, apibūdinanti nuostolius medžiagoje [32]. Nagrinėjant skaidrias medžiagas regimojoje elektromagnetinių bangų spektro dalyje menamoji dielektrinės skvarbos dalis dažnai yra neįskaitoma, tačiau nagrinėjant metalus ši dalis yra itin svarbi.

Optinių medžiagų savybių nagrinėjimas pradedamas nuo pagrindų: medžiagų optinių savybių nustatymui naudojama dalelės (atomo ar elektrono) jėgų balanso lygtis. Individualų elektroną veikiančių jėgų visumą galime aprašyti *Abraham-Lorentz* jėgų balanso lygtimi:

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + m\Gamma \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + m\omega_0^2 \mathbf{r} = -e\mathbf{E}, \quad (1.16)$$

čia m yra efektyvi elektrono masė kristale, e – elektrono krūvis, Γ – slopinimo (nuostolių) koeficientas, o ω_0 – rezonansinis dažnis. Paprastai tariant, elektrinio lauko sukeliama jėga yra lygi dalelės judesio kiekio kitimo spartos (inercijos), trinties jėgos (nuostolių) ir tamprumo jėgos sumai.

Paprasčiausias ir dažniausiai naudojamas dielektrinės skvarbos modelis yra taip vadinamas *Drude* modelis. Literatūroje randamas ir laisvųjų elektronų modelio pavadinimu, šis modelis paremtas prielaida, kad medžiaga gali būti apibūdinama kaip laisvųjų elektronų dujos. Todėl gali būti puikiai taikomas būtent metalų optinių savybių nustatymui. Metaluose išorinių sluoksnių elektronai tampa bendri visam kristalui – gali laisvai judėti visame kristale. Tai reiškia, kad ignoruojama sąveika tarp susidūrimų, tad trečiojo (rezonansinio) lygties nario galime nepaisyti:

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + m\Gamma \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = -q\mathbf{E}, \quad (1.17)$$

tuomet sprendinys (elektrono atstumas nuo jo pusiausvyros padėties):

$$\mathbf{r}(\omega) = \frac{e}{m} \frac{\mathbf{E}(\omega)}{(\omega^2 + i\Gamma\omega)}. \quad (1.18)$$

Žinodami tai, kad tokiu atstumu esančių priešingo ženklo krūvių dipolinis momentas $\boldsymbol{\mu}(\omega)$ yra proporcingas medžiagos poliarizacijos vektoriui (indukuotas poliarizuotumas yra lygus N dipolių vidutiniam dipoliniam momentui [26]):

$$\mathbf{P}(\omega) = N\langle \boldsymbol{\mu}(\omega) \rangle = N\langle e\mathbf{r}(\omega) \rangle, \quad (1.19)$$

o šis taip pat priklauso nuo elektrinio lauko (1.8 lygtis). Taigi suformuojame lygčių sistemą ir randame dielektrinio jautrio išraišką:

$$\chi(\omega) = -\frac{\omega_p^2}{(\omega^2 + i\Gamma\omega)}, \quad (1.20)$$

kurioje pažymėtas plazmos dažnis lygus:

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m}, \quad (1.21)$$

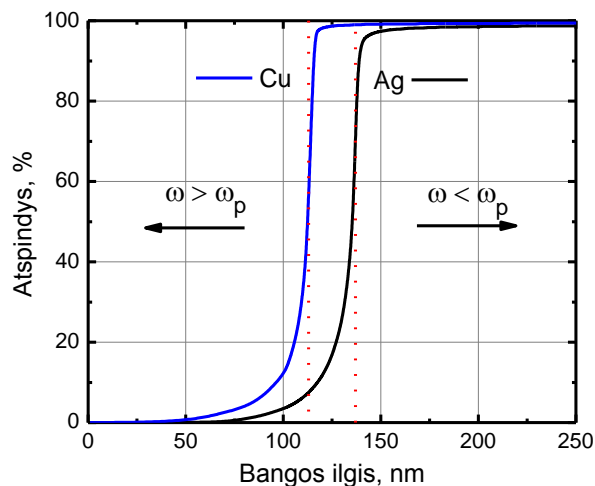
čia N lygus laisvųjų elektronų tankiui. Naudojantis 1.20 lygtimi ir prisiminus 1.10 lygtį, galima nesudėtingai išreikšti ir dielektrinę funkciją:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\Gamma_0\omega}. \quad (1.22)$$

Ši išraiška ir yra minėtasis *Drude* modelis. Joje pagrindinis medžiagos parametras yra plazmos dažnis. Tam, kad geriau būtų galima suprasti plazmos dažnio sąryšį su metalų optinėmis savybėmis, 1.1 lentelėje yra pateikti kelių dažnai metalinėms dangoms, tame tarpe ir apertūroms, naudojamų tauriųjų metalų laisvųjų elektronų tankiai ir plazmos dažniai. Taip pat 1.1 paveiksle pateikta atspindžio priklausomybė nuo spinduliuotės bangos ilgio plazmos dažnio atžvilgiu. Atspindys apskaičiuotas pasinaudojant *Drude* modeliu išreikšta dielektrinės skvarbos funkcija.

1.1 lentelė. Dažniausiai naudojamų tauriųjų metalų (aukso, sidabro ir vario) plazmos dažniai ir juos atitinkantys bangos ilgiai [33].

| | ω_p , eV | λ_p , nm |
|---------------|-----------------|------------------|
| Auksas (Ag) | 9,03 | 137,3 |
| Sidabras (Au) | 9,01 | 137,6 |
| Varis (Cu) | 10,83 | 114,5 |



1.1 pav. Metalo atspindžio priklausomybė nuo bangos ilgio, pabrėžiant sąsają su metalų plazmos dažniu (vertikalios taškinės linijos). Pateikiami sidabro (Ag) ir vario (Cu) atspindžio spektrai trumpųjų bangų srityje.

Kaip matome paveiksle, plazmos dažnis yra tarsi kritinis *Drude* modelio parametras: žinodami plazmos dažnį galime nurodyti metalų sugerties ribą. Kitaip tariant, elektromagnetinės spinduliuotės dažniui viršijant plazmos dažnį viskas sugerama, o atvirkščiai – atsispindi.

Drude modeliu (1.22 lygtis) galime aprašyti metalų dielektrinę skvarbą. Tačiau, kaip publikuota straipsnyje [33], atliekant skaičiavimus, naudojantis tik šiuo modeliu, pasiekti teoriniai rezultatai tam tikruose elektromagnetinių bangų diapazonuose ne visiškai sutampa su eksperimentiniais. Taip yra dėl to, kad modelis negali tiksliai atitikti metalų dielektrinės skvarbos didelių dažnių (ultravioletinės spinduliuotės) diapazone. Geras ir paprastas pavyzdys yra vizualinis aukso ir sidabro palyginimas: kaip matome 1.1 lentelėje, jų parametrai (plazmos dažnis) yra beveik identiški ir natūralu, jog pagal *Drude* modelį dielektrinės funkcijos regimojoje ir infraraudonojoje srityje sutampa, tačiau realybėje mes turime skirtingų spalvų metalus.

Dielektrinės funkcijos patikslinimui naudojamas *Lorentz* modelis, kuris įprastai skirtas dispersinių medžiagų su daugybe rezonansinių dažnių tyrimui. Tai tokios medžiagos kaip vanduo, turinčios daugybę virpesinių lygmenų, ar kiti dielektrikai. Šiuo atveju jėgų balanso lygtyje (1.16 lygtis) jau reikia įskaičiuoti prieš tai pašalintą rezonansinį narį. Tokios lygties sprendimas yra tapatus, tad nebus detalai nagrinėjamas, tačiau pateikiama modelio išraiška:

$$\varepsilon(\omega) = \sum_{j=1}^n \frac{f_j \omega_p^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\Gamma_j \omega}, \quad (1.23)$$

čia f_j – osciliatoriaus stipris (koeficientas). Taigi *Lorentz* modelis, paremtas slopstančiu harmoniniu osciliatoriumi, pabrėžiant elektronų tarpjuostinius šuolius su prielaida, kad elektronas yra tiesiogiai, tarsi spyruokle, susietas su gerokai sunkesniu atomo branduoliu.

Drude ir *Lorentz* pasiūlyti modeliai gali būti apjungti taip pasiekiant optimalų rezultatą [30]. *Drude-Lorentz* (DL) modelyje įtrauktas tiek laisvųjų elektronų, tiek apriboto elektrono efektas [33]:

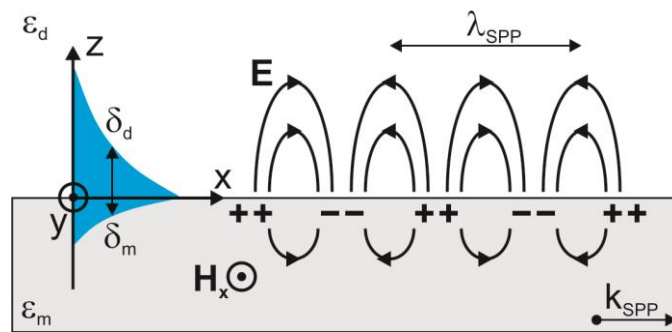
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\text{Drude}}(\omega) + \varepsilon_{\text{Lorentz}}(\omega), \quad (1.24)$$

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{j=0}^n \frac{f_j \omega_p^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 + i\Gamma_j \omega}. \quad (1.25)$$

Toks modelis, kaip matysime darbo rezultatuose (3.1 skyriuje), turi puikią koreliaciją su eksperimentiniais dielektrinės skvarbos matavimais plačiame dažnių diapazone ir tinka metalinių periodinių subbanginių struktūrų modeliavimui.

1.3. Paviršiaus plazmonų poliaritonai

Paviršiaus plazmonų poliaritonų (angl. *surface plasmon polaritons* (SPP)) sąvoka įvedama tiriant elektromagnetinės bangos sklidimą dviejų medžiagų (metalo ir dielektriko) sąlyčio paviršiuje. Paviršinė terpių sandūroje sklindanti banga, kuri atsiranda dėl išorinės elektromagnetinės spinduliuotės sąveikos (angl. *coupling*) su kolektyvinėmis metalo išorinio sluoksnio elektronų osciliacijomis (plazmonais), ir yra vadinama SPP (1.2 pav.).



1.2 pav. Paviršiaus plazmonų poliaritonai (SPP), susidarantys dėl išorinės spinduliuotės poveikio metalo (m) ir dielektriko (d) sandūroje [34].

Minėtą sklindančią paviršinę bangą galime aprašyti:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(z)e^{i(\beta x - \omega t)}, \quad (1.26)$$

čia β yra sklidimo konstanta:

$$\beta = n \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (1.27)$$

kurią įterpę į *Helmholtz* lygtį (1.14 lygtis) išreiškiame:

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + (\omega^2 \mu \varepsilon - \beta^2) \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.28)$$

Kadangi sprendžiame harmoninį uždavinį ($e^{-i\omega t}$), perrašome *Maxwell* lygtis:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega\mathbf{B}, \quad (1.29)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = -i\omega\mu\epsilon\mathbf{E}. \quad (1.30)$$

Elektromagnetinės bangos sklidimas vyksta išilgai x ašies ir erdvinis pokytis z ašyje yra minimalus. Iš rotorių galime išreikšti sąryšius, kuriuos galima priskirti skersinei elektrinei (angl. *transverse electric* (TE)) ir skersinei magnetinei (angl. *transverse magnetic* (TM)) modoms.

TM modos atveju turėsime sąryšius:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B_y}{\partial z} = i\omega\mu\epsilon E_x \\ i\beta B_y = -i\omega\mu\epsilon E_z \\ \frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega B_y \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E_x = -i \frac{1}{\omega\mu\epsilon} \frac{\partial B_y}{\partial z} \\ E_z = -\frac{\beta}{\omega\mu\epsilon} B_y \\ \frac{\partial^2 B_y}{\partial z^2} + (\omega^2\mu\epsilon - \beta^2)B_y = 0 \end{array} \right., \quad (1.31)$$

kuriuose

$$k_n^2 = \beta^2 - \omega^2\mu_n\epsilon_n, \quad (1.32)$$

kur n atitinka terpės skaičių. Nagrinėjant elektromagnetinių bangų sklidimą dviejų terpių (medžiagų) sąlyčio paviršiuje (atitinkamai $n = 1$ ir $n = 2$) ir darant prielaidą, kad abi medžiagos nėra magnetinės ($\mu_1 = \mu_2$), tangentiniai lauko komponentai B_y ir E_x turi būti tolygus visame lauke, tad turi būti patenkinama sąlyga:

$$\frac{k_1}{k_2} = -\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}. \quad (1.33)$$

Tam, kad paviršinė banga būtų išlaikoma sąlyčio paviršiuje, realiosios bangos vektoriaus dalys turi būti teigiamos, kas atitinkamai pagal 1.33 lygtį reikalauja, kad medžiagų kompleksinės dielektrinės skvarbos būtų priešingų ženklų. Būtent metalo ir dielektriko sąlyčio atveju ši sąlyga ir yra tenkinama, nes metalai pasižymi tuo, kad jų dielektrinė skvarba regimojoje ir ilgesnių bangų srityse yra neigiama (pavyzdys pateiktas 3.1 skyriuje).

TE modos atveju turèsime šiuos sąryšius:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega B_x \\ i\beta E_y = i\omega B_z \\ \frac{\partial B_x}{\partial z} - i\beta B_z = -i\omega\mu\epsilon E_y \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B_x = \frac{i}{\omega} \frac{\partial E_y}{\partial z} \\ B_z = \frac{\beta}{\omega} E_y \\ \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (\omega^2\mu\epsilon - \beta^2)E_y = 0 \end{array} \right. , \quad (1.34)$$

šiuo atveju gaunama sąlyga kiek kitokia:

$$k_1 + k_2 = 0 . \quad (1.35)$$

Priešingai nei TM, realios bangos vektoriaus dalys netenkina TE sąlygos, todėl banga nebus išlaikoma terpių sandūroje.

Grįžtant prie SPP atvejo (1.33 lygtis) ir atkreipiant dėmesį, jog lauko vektoriaus dedamoji SPP sklidimo kryptimi yra tapati metalui (m) ir dielektrikui (d):

$$k_{x,m} + k_{x,d} = k_x , \quad (1.36)$$

pagal lauko vektorių kiekvienai medžiagai galima išreikšti:

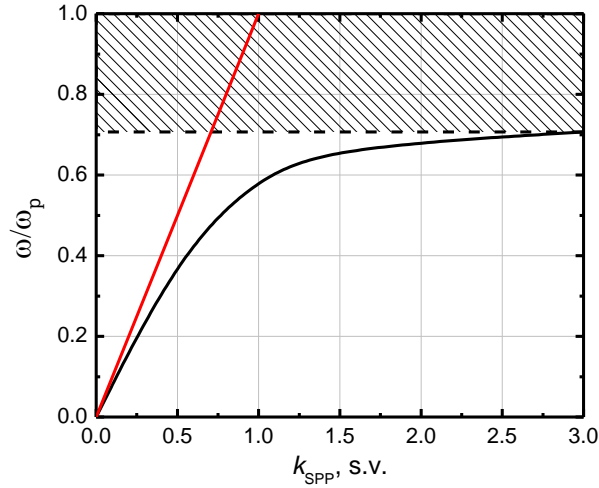
$$k_x + k_1 = \epsilon_m \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 , \quad (1.37)$$

$$k_x + k_2 = \epsilon_d \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 . \quad (1.38)$$

Tuomet išsprendę lygčių sistemą atitinkamai pažymime:

$$k_x(\omega) = k_{\text{SPP}}(\omega) = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\epsilon_d \epsilon_m}{\epsilon_d + \epsilon_m} \right)^{1/2} , \quad (1.39)$$

kas atitinka plazmonų bangos fundamentinį veikimą (1.3 pav.).



1.3 pav. SPP dispersijos sąryšis. Plazmonų bangos vektorius visada didesnis už šviesos bangos vektorių erdvėje: nors artimojoje zonoje polaritonas elgiasi kaip šviesa, tačiau artėjant prie $1/\sqrt{2}$ (horizontali brūkšninė linija) pakinta.

Prisiminę dielektrinės skvarbos kompleksiškumą (1.15 lygtis) pastebime, kad SPP bangos vektorius taip pat yra kompleksinis dydis:

$$k'_{\text{SPP}} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m} \right)^{1/2}, \quad (1.40)$$

$$k''_{\text{SPP}} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m} \right)^{3/2} \frac{\varepsilon''_m}{2\varepsilon'^2_m}. \quad (1.41)$$

Menamoji dalis atspindi vidinius (ominius) nuostolius, taip išreiškiant, jog SPP gali skliti tik baigtinį nuotolį:

$$l_{ohm} = (2k''_{\text{SPP}})^{-1}. \quad (1.42)$$

Šis, vadinamasis SPP difuzijos nuotolis, regimajame elektromagnetinių bangų diapazone sidabru ir auksui siekia apie $10 \mu\text{m}$ [21]. Taip pat verta žinoti, kad bangos vektorius statmenai bandinio atžvilgiu yra menamas ir elektromagnetinis laukas eksponentiškai slopsta tostant nuo paviršiaus:

$$\delta_d = \frac{1}{|k_{z,d}|} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}{\varepsilon_d^2} \right)^{1/2}, \quad (1.43)$$

$$\delta_m = \frac{1}{|k_{z,m}|} = \frac{\omega}{c} \left(\frac{\varepsilon_d + \varepsilon'_m}{\varepsilon_m'^2} \right)^{1/2}. \quad (1.44)$$

Taigi didžiausias lauko intensyvumas yra terpių sandūroje, tiksliau paviršiuje, tad medžiagos paviršiaus savybės yra itin svarbus aspektas.

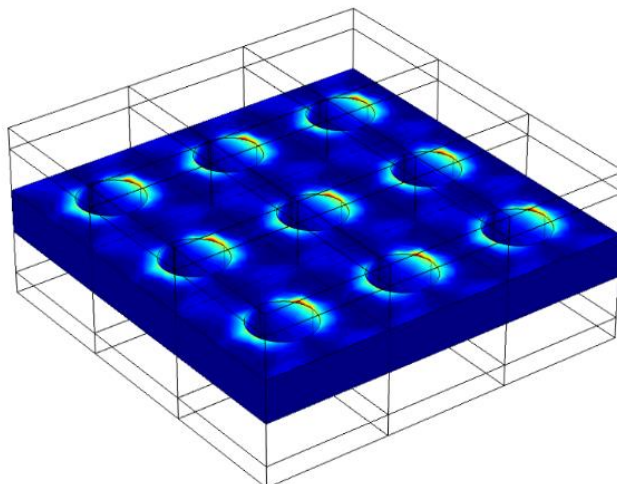
Kaip pavaizduota 1.3 paveiksle, SPP bangos vektorius visada didesnis už erdvinės bangos vektorių, o tai galima pritaikyti ir eksperimentiniam SPP generavimui. Pagal tvermės dėsnį nėra įmanoma sužadinti SPP plokščiam metalo paviršiuje [21], išskyrus tuomet, kai bangos prasiskverbimo gylis (1.44 lygtis) viršija metalo sluoksnio storį (orientaciškai, jei krintanti šviesa yra 600 nm, tai numanomas SPP prasiskverbimo gylis aukse sieks apie 30 nm) arba paviršiuje formuojant įvairias struktūras, gardeles ir periodines apertūras [35].

1.4. Sustiprintas optinis pralaidumas (EOT)

Tiriant šviesos sklidimą per apertūras stebime šviesos intensyvumo kitimą apertūrai statmena kryptimi. Sklidimas per apertūras nagrinėtas jau seniai ir ilgą laiką buvo remiamasi tradicine difrakcijos teorija [2], pagal kurią apertūros pralaidumas proporcingas apertūros spindulio ir bangos ilgio santykiui:

$$T = \frac{64}{27\pi^2} (kr)^4 \propto \left(\frac{r}{\lambda_0} \right)^4. \quad (1.45)$$

Tačiau, jei metalo sluoksnyje yra suformuotos periodinės apertūros (1.4 pav.), stebimas gerokai didesnis intensyvumas – EOT [4, 5, 10, 36-43].



1.4 pav. Subbanginių skylės formos apertūrų matrica.

Optinis pralaidumas apertūrų, kurios yra mažesnes už į jas krintančią elektromagnetinę spinduliuotę, gali būti valdomas, priklausomai nuo apertūros formos, dydžio ir kitų parametų, ir net padidintas iš apertūrų formuojant periodines struktūras [10].

Pagrindinis EOT aiškinantis mechanizmas tai 1.3 skyriuje minėtas SPP sužadinimas apertūros paviršiuje. Sklindant paviršiniams plazmonų poliaritonams energija yra pernešama į kitą apertūros pusę ir čia išsklaidoma į tolimąjį lauką [8]. Teisingai mąstant šis fenomenas turėtų būti užfiksuojamas ir pavienės apertūros atveju [38, 39, 44]. Tačiau periodinės struktūros veikia efektyviau, nes periodinis darinys yra tarsi gardelė, leidžianti susiformuoti ne tik pagrindinėms, bet ir aukštesnėms SPP modoms (i, j):

$$k_{\text{SPP}} = k_x \pm iG_x \pm jG_y = k_0 \sin \theta \pm (i + j) \frac{2\pi}{a_0}, \quad (1.46)$$

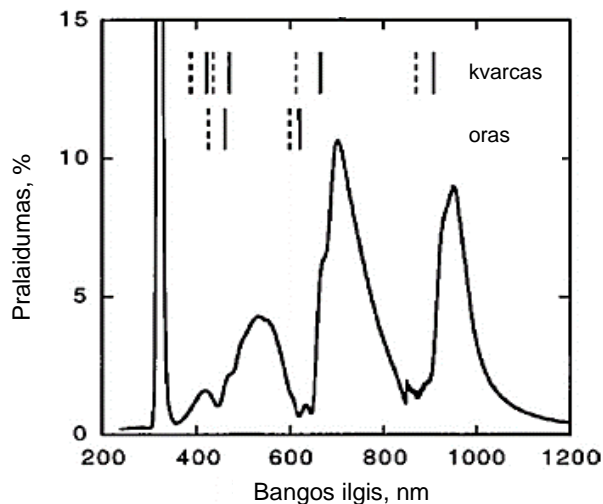
čia G – gardelės vektorius dedamosios, a_0 – apertūrų periodas. Prisiminę 1.39 lygtį, kai spinduliuotė krinta statmenai ($\theta = 0$), galime apskaičiuoti rezonansinių juostų pozicijas:

$$\lambda_{\text{SPP}}(i, j) = \frac{a_0}{(i^2 + j^2)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\varepsilon_d \varepsilon'_m}{\varepsilon_d + \varepsilon'_m} \right)^{1/2}. \quad (1.47)$$

Paviršiaus plazmonų poliaritonai gali būti sužadinti abiejose spinduliuote veikiamo metalo sluoksnio pusėse [45]. Taigi, jei tai yra danga, turime įskaityti tiek viršutinio sluoksnio (oro), tiek apatinio sluoksnio (dažniausiai stiklo, bet gali būti ir kitas dielektrikas) dielektrines skvarbas. Dielektrikų atveju tai yra konstantos, tad rezonansines juostas apytiksliai apskaičiuoti nėra sudėtinga. Tiesiog reikia atkreipti dėmesį į tai, kad metalo dielektrinė skvarba priklauso nuo bangos ilgio (daugiau informacijos apie tai 1.2 skyriuje).

Taip pat pralaidumo spektrai, tiksliau spektrų minimalios vertės, yra sietinos su *Wood* anomalija [1]. Tai yra, jei kritusi šviesa difraguoja statmenai kritimo kampui, kitaip tariant, lūžta pagal medžiagos paviršių. Tuomet priklausomai nuo dielektrinės aplinkos (aplinkos dielektrinės skvarbos) apskaičiuojame pralaidumo spektro minimumus:

$$\lambda_{\text{min}} = \frac{a_0}{(i^2 + j^2)^{\frac{1}{2}}} \varepsilon_d^{1/2}. \quad (1.48)$$



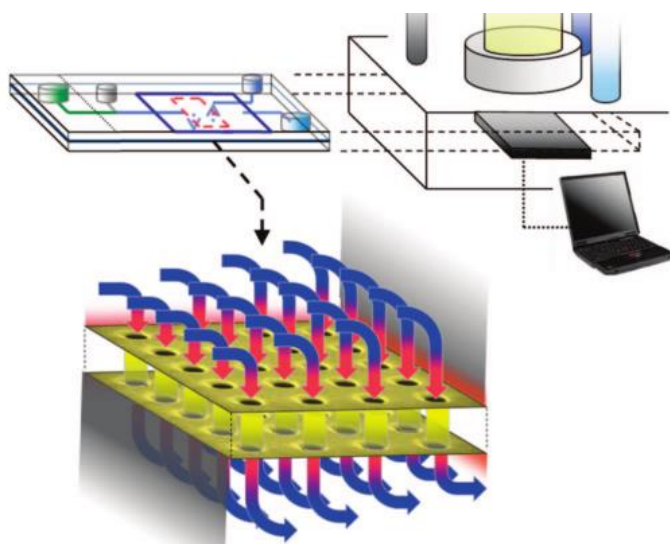
1.5 pav. Vienas pirmųjų užfiksuotų EOT spektrų iš [4]: 300 nm apertūros suformuotos 200 nm storio sidabro sluoksnyje kas 600 nm. Brūkšninėmis linijomis žymimos plazmonų modos.

Apibendrinant, ties tam tikrais elektromagnetinės spinduliuotės bangos ilgiais, krintanti spinduliuotė sąveikauja su SPP modomis dėl periodiškai struktūrizuoto metalo paviršiaus gardeles savybių. Rezonansinėmis sąlygomis paviršinės bangos sudaro stovinčias bangas su lokalizuotu maksimumu ties apertūromis, o tai ir lemia sustiprintą pralaidumą. Detaliau su EOT galima susipažinti darbo rezultatuose. EOT pirmą kartą pademonstruotas 1998 m. (1.5 pav.). Pirmojoje EOT publikacijoje pateiktas pralaidumo spektras 3.2 skyriuje palyginimas su šiame darbe atliktu modeliavimu.

1.5. Pritaikymo perspektyvos

Subbanginių apertūrų pritaikymo galimybės dėl EOT suteikiamų privalumų yra itin plačios: dažniui selektyvūs paviršiai (filtra) [12, 13], paviršiumi sustiprinta *Raman* sklaida [14], metalu sustiprinta fluorescencija [15, 17] ir įvairių konfigūracijų jutikliai [18, 21].

Pastaruoju metu daug dėmesio skiriama jutikliams, kaip vienam iš pagrindinių potencialių SPP taikymų. Kadangi, kaip 1.3 ir 1.4 skyriuose minėta, SPP (taigi ir EOT) priklauso nuo metalinės apertūros ir ją supančios dielektrinės aplinkos (oro, stiklo ar panašiai), yra manoma, kad ant metalo paviršiaus ar net per metalines apertūras (pavyzdžiui aukso ar sidabro, nes šis metalai pasižymi ryškiomis rezonansinėmis juostomis regimajame spektro diapazone (žr. modeliavimo rezultatus)) tekant tiriamajam tirpalui prie metalo prikibusios molekulės turėtų moduluoti dielektrinę skvarbą ir taip įtakoti pralaidumo spektrą – sukelti juostos poslinkį [18].



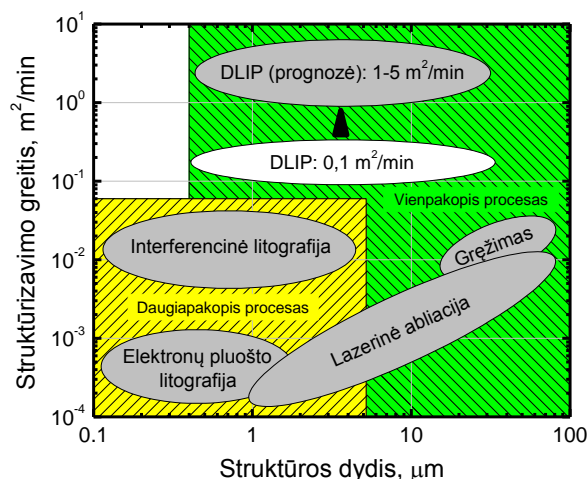
1.6 pav. Periodinių subbanginių apertūrų jutiklis integruotas į mikrofluidinį lustą, kurio monitoringas vykdomas realiu laiku. Pritaikymo iliustracija iš [18].

Nanometrinių apertūrų (skylių) panaudojimas yra vertas dėmesio ir dėl to, kad dėl mažų struktūrų matmenų tiriamasis objektas gali būti išskaidomas į labai mažus tūrius taip pasiekiant didelį eksperimentinį tikslumą [18]. Daugelis biologinių ir biocheminių vyksmų vyksta esant didelei medžiagos koncentracijai, bet kinetinius procesus galime stebėti tik esant labai nedideliame tiriamosios medžiagos kiekiui. Įprastais metodais to nepasieksime, tačiau subbanginės apertūros veikia ir kaip reakcijų kameros (tiriamąjį mėginį išskaidančios į atolitrus (10^{-18} l) ar net mažiau siekiančias dalis [45]), kurios suteikia galimybę tuo pat metu stebėti daugybę lygiagrečių eksperimentų.

Tokie mikroprietaisai (angl. *lab-on-chip*), potencialiai pritaikomi chemijos ir biomedicinos srityse, yra tik vienas iš daugelio periodinių subbanginių apertūrų pritaikymo perspektyvų.

1.6. Apertūrų formavimo technologijos

Periodinių subbanginių apertūrų, arba bendrai plazmoninių struktūrų, formavimas nėra visiškai nauja sritis. Tokios struktūros sėkmingai formuojamos įvairiomis litografijos technologijomis: optinių bangų interferencine litografija, elektronų pluošto litografija, fokusuoto jonų pluošto litografija, taip pat atominių sluoksnių nusodinimo metodu bei kitomis lazerinėmis technologijomis [46]. Dalis medžiagų paviršiaus struktūrizavimo vienpakopių ir daugiapakopių technologijų pateikta ir palyginta 1.7 paveiksle. Tarp jų ir šiame darbe akcentuojamos lazerinės technologijos: tiesioginis lazerinis rašymas (angl. *direct laser writing* (DLW)) ir tiesioginis lazerinis interferencinis struktūrizavimas (angl. *direct laser interference patterning* (DLIP)).



1.7 pav. Medžiagų paviršiaus apdirbimo technologijų pasiskirstymas pagal struktūrų dydį ir jų formavimo greitį [47].

Medžiagų mikroapdirbime dažniausiai naudojamų lazerių spinduliuotės fundamentinis bangos ilgis yra apytiksliai vienas mikrometras (neodimio jonais legiruoto itrio aliuminio granato (Nd:YAG) lazeris – 1064 nm, iterbiu legiruoto kalio gadolinio volframoto (Yb:KGW) lazeris – 1030 nm). Atitinkamai, efektyvus lazerių panaudojimas nanofotonikoje (iš esmės, nanoapdirbime) yra probleminis klausimas, nes įprastais būdais suformuoti subbangines plazmonines struktūras, veikiančias regimosios šviesos diapazone, yra gan sudėtinga dėl paprasčiausio difrakcinio apribojimo:

$$d = \frac{\lambda}{NA}, \quad (1.49)$$

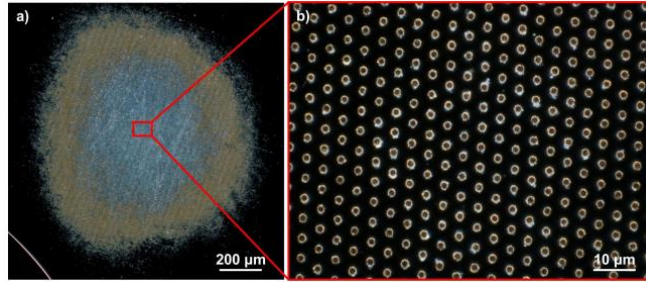
čia NA – yra fokusuojančio objektyvo skaitinė apertūra, tad lazerinės abliacijos būdu norint formuoti kelių šimtų nanometrų dydžio struktūras, reikalinga itin aštriai fokusuojanti optika (imersiniai objektyvai) ir kuo trumpesnio bangos ilgio lazerio spinduliuotė (pavyzdžiui, trečioji minėto Nd:YAG lazerio spinduliuotės harmonika – 355 nm). Taigi įprastu atveju gamybos procesas tampa labai brangus ir sunkiai kontroliuojamas, tad reikalingos alternatyvos.

1.6.1. Tiesioginis lazerinis interferencinis struktūrizavimas (DLIP)

Įprasta lazerine litografija mažu intensyvumu aktyvinamas fotorezisto sluoksnis. Tai reiškia, kad periodinių struktūrų formavimas ant metalų, keramikų ar kitų medžiagų galimas tik kaip kelių etapų procesas (daugiapakopis procesas, detaliau žr. 1.7 paveikslą). Kitaip tariant, po lazerio veikos reikalingas papildomas apdirbimas: cheminis išdėinimas ar panašiai, o tai atitinkamai

mažina viso proceso našumą [48]. Didelės energijos lazerine spinduliuote galime pasiekti viendimensines ir dvidimensines struktūras vienu žingsniu (vienpakopis procesas).

DLIP – tai tiesioginė medžiagos abliacija, panaudojant periodinį intensyvumo pasiskirstymą, suformuotą dėl daugiapluoštės interferencijos (1.9 pav.). Šiuo metodu yra išnaudojama visa lazerio impulso energija, tad, kaip pavaizduota 1.8 paveiksle, galima formuoti periodines struktūras dideliame plote vos su vienu lazerio impulsu [22, 49, 50].



1.8 pav. Interferencinis pažeidimas naudojant 6 interferuojančius pluoštus: kairėje pateiktas visas pažeidimo vaizdas, dešinėje – priartintos periodinės struktūros [23].

Elektromagnetinių bangų interferencija pasireiškia, kai tam tikru kampu sąveikauja bent du koherentiniai spinduliai. Bendru atveju, intensyvumo skirstinys interferencijos plote gali būti aprašytas [51]:

$$I(\mathbf{r}) \propto \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) \right)^2 \right\rangle, \quad (1.50)$$

čia erdveje (\mathbf{r} – koordinatės vektorius, t – laikas) sumuojame kiekvieną (nuo 1 iki N) elektrinio lauko vektorių:

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{0i} \cos(\mathbf{k}_i \mathbf{r} - \omega t + \varphi_i), \quad (1.51)$$

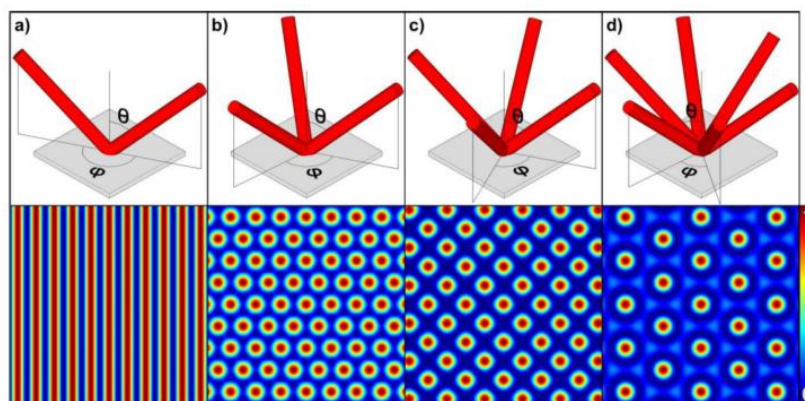
kur \mathbf{E}_{0i} yra elektrinio lauko amplitudė, \mathbf{k}_i – vektorius, ω – dažnis, o φ_i – fazė. Jei visų sąveikaujančių bangų dažnis sutampa, galime supaprastinti lygtis, ir išvesti intensyvumo išraišką:

$$I(r) \propto \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N |\mathbf{E}_{0i}|^2 + \sum_{j < i}^N \sum_{i=1}^N \mathbf{E}_{0i} \cdot \mathbf{E}_{0j} \times \cos(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r} - \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} + \varphi_i - \varphi_j). \quad (1.52)$$

Keisdami sąveikaujančių pluoštų kiekį, pasiekiami skirtingus intensyvumo skirstinius (1.9 pav.). Keturių pluoštų interferencijos atveju, teoriškai pasiekiamas periodas lygus [51]:

$$\Lambda_4 = \frac{\lambda}{\sqrt{2} \sin \theta}, \quad (1.53)$$

čia θ yra kampas tarp interferuojančių pluoštų.



1.9 pav. Periodiniai intensyvumo skirstiniai, kurie gaunami, interferuojant 2 (a), 3 (b), 4 (c) ir 6 (d) simetriškai suvestiems lazerio pluoštams. Pluoštų išdėstymas pateiktas viršuje, o santykinis intensyvumo pasiskirstymas bandinio paviršiuje – apatiniuose paveikslėliuose [22].

DLIP gali būti sėkmingai naudojamas ne tik periodinių apertūrų formavimui, bet ir įvairių paviršių struktūrizavimui siekiant pagerinti paviršiaus savybes: sumažinant paviršiaus šiurkštumą, arba priešingai, padidinant, taip sustiprinant hidrofobines ar hidrofilines paviršiaus savybes. Struktūrizavimas dažnai naudojamas kaip metodas trinties sumažinimui. Funkcinių paviršių savybės taip pat priklauso nuo įvairių struktūros parametrų: periodo, periodinių pažeidimų formos, dydžio ir taip toliau [48].

1.6.2. Lazerinių technologijų palyginimas

Submikroninius pažeidimus taip pat galima pasiekti valdant ultratrumpųjų impulsų lazerių spinduliuotės intensyvumą – medžiaga modifikuojama tik centrine lazerio pluošto dalimi (1.10 pav.). Taip pasiekiamų struktūrų dydis apskaičiuojamas pagal:

$$d = d_0 \left(\ln \frac{F}{F_{th}} \right)^2, \quad (1.54)$$

kur d_0 – lazerio pluošto diametras, F yra spinduliuotės įtėkis, o F_{th} – įtėkis ties abliacijos slenksčiu, priklausantis nuo medžiagos savybių [52]:

$$F_{th} = \frac{\rho(C_p T_m + q_m + q_v)L_{th}}{(1 - R)(1 - e^{-\alpha d})}, \quad (1.55)$$

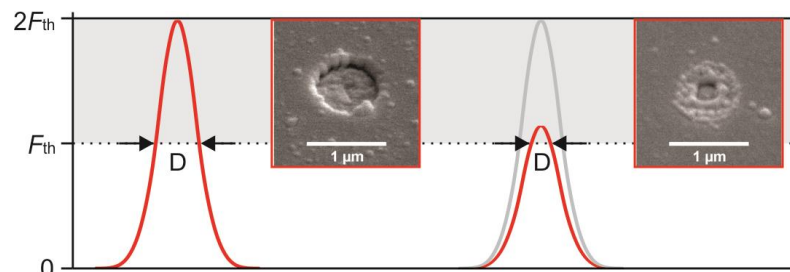
čia ρ – tankis, C_p – savitoji šilumos talpa, T_m – lydymosi temperatūra, q_m ir q_v – lydymosi ir virimo šiluma, R – atspindžio koeficientas, α – sugerties koeficientas, o d – medžiagos sluoksnio storis, kur L_{th} – šiluminio laidumo nuotolis:

$$L_{th} = \sqrt{2\kappa\tau_L} = \sqrt{2 \frac{K}{\rho C_p} \tau_L}, \quad (1.56)$$

kur K – šiluminis laidumas, τ_L – lazerio impulso trukmė. Taigi medžiagos pažeidimo riba priklauso ne tik nuo lazerio spinduliuote veikiamos medžiagos, bet ir tiesiogiai nuo veikimo laiko, tiksliau lazerio impulso trukmės:

$$F_{th} \propto \sqrt{\tau_L}. \quad (1.57)$$

Teoriškai dirbant ties slenksčio riba įmanomi itin maži pažeidimai, tačiau praktiškai tam didelę įtaką turi įvairūs lazerio spinduliuotės nestabilumai: intensyvumo fluktuacijos, prastas pluošto homogeniškumas ir taip toliau [53]. Optimizavus eksperimentinę sistemą, pasiekiami kelių šimtų nanometrų dariniai [54]. Tačiau, nepaisant to, nanometrinių struktūrų gamyba tampa dar sudėtingesnė, jei norimos ne vienetinės, o periodiškai pasikartojančios struktūros.



1.10 pav. Tiesioginis subdifracinių pažeidimų formavimas valdant ultratrumpųjų lazerių spinduliuotės energijos tankį. Dešinėje pateiktas pavyzdys, kaip sumažinus spinduliuotės energijos tankį pasiekiamas kelių šimtų nanometrų dydžio pažeidimas [53, 54].

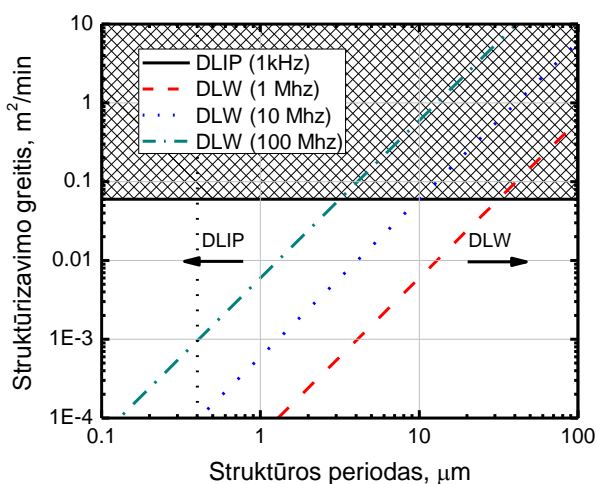
Tiesioginio lazerinio rašymo metodu (DLW) struktūrą formuojant pavieniais impulsais galima pasiekti periodinius pažeidimus dideliame plote, tačiau tai nėra taip efektyvu, kaip naudojant tiesioginį lazerinį interferencinį struktūrizavimą (detaliau žiūrėti 1.6.1 skyrių). Paviršiaus struktūrizavimo sparta DLW atveju gali būti apskaičiuota pagal pažeidimų periodą ir lazerio impulsų pasikartojimo dažnį [23]:

$$v_{DLW} = \frac{S}{t_{DLW}} = P^2 \times f . \quad (1.58)$$

Natūralu, jog vienetiniame plote pataškiui formuojant pažeidimus periodui mažėjant viso proceso trukmė ilgėja, tai yra greitis mažėja. Taip impulsiniu lazeriu ($f = 1$ kHz) formuojant $1 \mu\text{m}$ periodo struktūras ($v_{DLW} = 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$) 1 mm^2 plote užtruksime net 1000 s (apie 17 min), o 1 cm^2 – net beveik 28 valandas. DLIP metodo atveju apdirbimo sparta aprašoma taip [23]:

$$v_{DLIP} = \frac{S}{t_{DLIP}} = D^2 \times f , \quad (1.59)$$

čia D – interferencinio pažeidimo dydis, kuriam esant tolygiam 1 mm^2 teoriškai galime tikėtis suformuoti struktūras 1 mm^2 ar net 1 cm^2 plote greičiau nei per 1 s . Kaip matome 1.11 paveiksle, naudojant DLIP struktūrizavimo greitis neapiklauso nuo periodo, o žinodami periodą mes galime pasirinkti tinkamiausią metodą. Detaliau DLIP ir eksperimentinė sistema bus aptariama kitame skyriuje.



1.11 pav. Struktūrizavimo greitis priklausomai nuo struktūros periodo. Naudodami didelio impulsų pasikartojimo dažnio (1-100 MHz) lazerius DLW metodu galime pasiekti spartą, prilygstančią ar net didesnę už DLIP, tačiau formuojant submikrometrinius darinius DLIP išlieka nepalenkiamas.

2. Modeliavimo metodas ir priemonės

Šviesos sklidimo per periodines subbangines struktūras modeliavimas, nepaisant įvairių ribinių sąlygų, vis vien galiausiai siejasi su fundamentine teorija – *Maxwell* lygčių sprendimu. Šių lygčių ir jų sąryšių sprendimui gali būti pritaikyti įvairūs metodais. Visada sveikintina iniciatyva yra savo (atviro) kodo rašymas, bet tai yra gan keblu į eksperimentus orientuotoms mokslinėms grupėms. Tokiu būdu modeliuojant, kad ir grubiam eksperimentų palyginimui ir tolimesniam planavimui, reikalingas stiprus teorinis pagrindas ir susitelkimas. Pastaraisiais metais rinkoje atsirado daug komercinių programų, kurių tikslas yra supaprastinti skaičiavimų metodiką. Viena iš tokių programų, o tiksliau visas programinis paketas, yra *COMSOL Multiphysics*, kuris skaitiniu metodu (baigtinių elementų metodu) sprendžia dalinių išvestinių diferencialines lygtis.

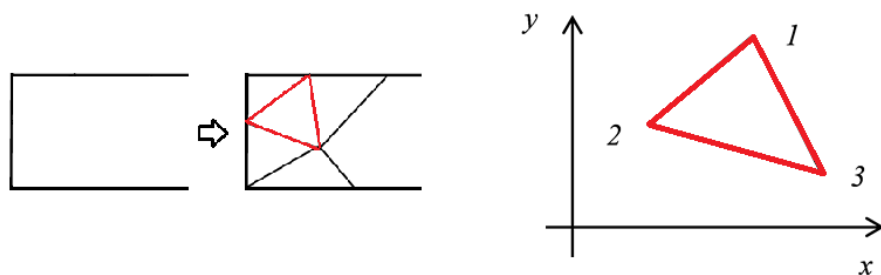
2.1. Baigtinių elementų metodas

Baigtinių elementų metodas (angl. *finite element method* (FEM)) yra skaitinė technika aproksimaciniam dalinių išvestinių diferencialinių lygčių sprendimui [55, 58]. Metodas išvystytas tiriant įtempius inžineriniuose taikymuose, tačiau dabar gali būti naudojamas įvairiuose mokslinėse disciplinose, tame tarpe šilumos perdavimo, elektrinio ir magnetinio lauko ir kituose skaičiavimuose. Šio metodo universalumas, turint mintyje ir tai, kad galima apjungti kelias disciplinas sprendžiant kompleksinius uždavinius, įgalina jo platų pritaikymą ir dėl to metodas populiarus tiek mokslinėse, tiek komercinėse srityse.

Išskiriami šie palaipsniui vykdomi FEM metodo žingsniai [56]:

- Sistemos diskretizavimas.
- Interpoliacinės funkcijos pasirinkimas.
- Elementų savybių nustatymas.
- Elementų lygčių suvedimas į bendrą sistemą.

Pagrindinė baigtinių elementų metodo idėja yra sudėtingos geometrijos objekto padalinimas į mažesnius elementus, juos aprašant per mazgų (angl. *nodal*) koordinates ir elementų jungtis, kitaip tariant sistemos diskretizavimas (2.1 pav.). Pavienis elementas yra paprastos geometrijos, tad žymiai lengviau analizuojamas lyginant su pirmine sistema. Šie elementai sujungiami viršūnėmis (angl. *vertices*) suformuojant vieningą tinklą (angl. *mesh*). Kiekviename elemente ieškomos tiriamojo lauko (elektromagnetinio lauko, temperatūros pasiskirstymo ir panašiai) vertės atskirai, aproksimuojant interpoliacinėmis funkcijomis. Dažniausiai pasirenkamos polinominės funkcijos, priklausančios nuo elementui priskirto mazgų skaičiaus.



2.1 pav. Sistemos skaidymas trikampaiais elementais (kairėje). Kiekvienas elementas (šiuo atveju 2D sistemoje) aprašomas pagal mazgus, išsidėsčiusius tam tikrose sistemos koordinatėse (dešinėje).

Bendras laukas FEM aprašomas [58]:

$$\varphi = \sum_{i=1}^m N_i \varphi_i, \quad (2.1)$$

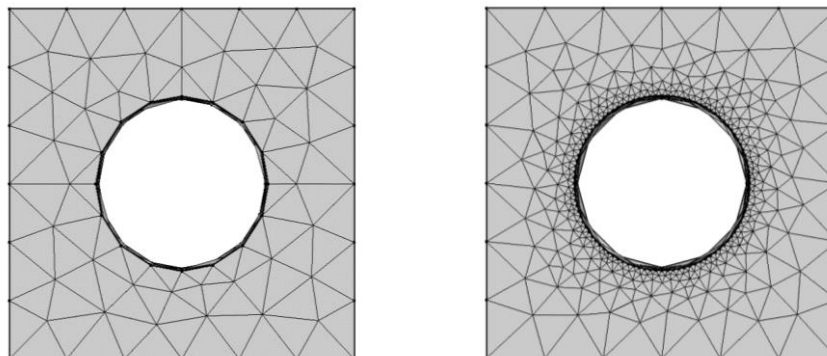
čia N_i – polinominės (interpoliacinės) funkcijos, o φ_i lauko vertės ties elementų viršūnėmis. Sprendimo rezultatų tikslumas stipriai priklauso nuo elementų skaičiaus, kas detalčiau aptariama 2.2 skyriuje.

2.2. *COMSOL Multiphysics* programinis paketas

COMSOL Multiphysics programinis paketas yra interaktyvi vartotojo sąsaja, skirta modeliavimui, mokslinių ir inžinerinių skaičiavimų atlikimui. Programinio paketo veikimas paremtas dalinių išvestinių diferencialinių lygčių sprendimu. Jame įdiegta patogi geometrinio atvaizdavimo sistema bei pateikta plati duomenų bazė medžiagų pasirinkimui. Priešingai nei įprastiniais dalinių išvestinių diferencialinių lygčių sprendimo metodais, naudojantis *COMSOL Multiphysics* programiniu paketu stiprus teorinis pagrindas nėra būtinas – programa maksimaliai automatizuoja lygčių sprendimą. Dėl didelio galimybių lankstumo ja efektyviai gali naudotis tiek paprastas vartotojas, tiek tiriamos srities specialistas.

Modelio kūrimo algoritmo pradžia yra objekto, ar jų visumos, geometrinis aprašymas ir atvaizdavimas įprastine grafine automatizuoto projektavimo sistema (angl. *computer aided design* (CAD)) bei medžiagos savybių įvedimas. Nepaisant to, kad programos paketo duomenų bazėje galima pasirinkti beveik visas dažniausiai praktikoje naudojamas medžiagas, yra galimybė įvesti korekcijas ir naujus parametrus. Medžiagų savybes galime aprašyti ne tik konstantomis, bet ir funkcijomis. Puikus to pavyzdys yra dielektrinės skvarbos aprašymas *Drude-Lorentz* modeliu, išreiškiant dielektrinės skvarbos priklausomybę nuo elektromagnetinės spinduliuotės bangos ilgio

(1.2 skyrius). Aprašius sistemos geometriją ir savybes atitinkamai įvedamos ribinės sąlygos, jėgos veikiančios sistemą, parametrų tarpusavio priklausomybės, kitimas laike [59].



2.2 pav. Skirtingas FEM tinklelio pasirinkimas *COMSOL Multiphysics* programiniame pakete: įprastas laisvai kintančių trikampių tinklelis (kairėje) ir adaptyvus laisvai kintančių trikampių tinklelis, su koncentruota sritimi ties pagrindine poveikio zona (dešinėje).

Kaip minėtą anksčiau (2.1 skyriuje) ir pavaizduota 2.1 paveiksle, baigtinių elementų metodo skaičiavimuose *COMSOL Multiphysics* programiniu paketu be minėtų žingsnių labai svarbus aspektas yra pačių elementų, jų dydžio ir kiekio nustatymas. Šis žingsnis, kitaip tariant sistemos diskretizavimas, yra vadinamas tinklelio (angl. *mesh*) formavimu. sistema skirstoma tinkleliu į baigtinius elementus tiksliam dalinių išvestinių diferencialinių lygčių sprendimui. Žinoma, didinant elementų skaičių (formuojant smulkesnį tinklelį) galima tikėtis tikslesnių rezultatų, bet diskretizuojant sistemą būtina atsižvelgti ir į kompiuterio resursus. Atsižvelgiant į tai, programiniame pakete galima pasirinkti ne tik elemento formą, jo maksimalų ir minimalų dydžius, bet ir valdyti elementų pasiskirstymą, optimizuojant turimus resursus.

COMSOL Multiphysics programinis paketas išskaidytas į modulius pagal tiriamų fizikinių reiškinių sritis. Pateikiami elektromagnetinių bangų, akustinių bangų, šilumos perdavimo bei kiti moduliai, tačiau yra ir galimybė naudoti kelis modulius vienu metu, pavyzdžiui tiriant elektromagnetinių bangų sklaidimą skaidriomis terpėmis ir dėl spinduliuotės intensyvumo sukulto temperatūros pokyčio susidariusius terminius įtempimus [60]. Nepaisant to, nagrinėjant periodinės apertūras terminis elektromagnetinių bangų spinduliuotės poveikis yra nykstamai mažas ir nėra įskaitomas, tad šiame darbe apsiribojama tik moduliu, skirtu elektromagnetinių bangų (šviesos) sklaidimui tirti.

3. Modeliavimo rezultatai

Išsikelto darbo tikslo vykdymas plėtotas palaipsniui. *Drude-Lorentz* modelis pritaikytas dielektrinės skvarbos vertėms sugeneruoti, verčių atitikimas palygintas su eksperimentiniais matavimais [61, 63]. Pasinaudojant šiomis vertėmis atliktas šviesos sklidimo per periodines subbangines struktūras skaičiavimas baigtinių elementų metodu *COMSOL Multiphysics* programiniu paketu.

Apertūrų optinis pralaidumas tirtas orientuojantis į regimosios šviesos diapazoną. Nagrinėtos įvairios priklausomybės nuo pasirinktos medžiagos, įvairių apertūros parametrų: metalo sluoksnio storio, apertūrų periodinio išdėstymo (atstumo tarp apertūrų), jų dydžio ir formos, kūgiškumo spinduliuotės kritimo kampo bei metalinės apertūros supančios aplinkos. Rezultatai palyginti su publikuotais straipsniais. Pagrindiniu atitikmeniu pasirinktas pirmasis EOT straipsnis [4], taip pat daug dėmesio skirta ir kitiems šios mokslinės grupės EOT tematika publikuotiems straipsniams [5, 10, 36-43].

3.1. *Drude-Lorentz* modelio pritaikymas

Tikslios dielektrinės skvarbos vertės yra labai svarbios EOT modeliavimui. Tiriant pralaidumą regimajame šviesos diapazone, pravartu ištirti ir artimausias jam ultravioletinės (UV) ir infraraudonosios (aIR) spinduliuotės sritis. Dėl laisvųjų elektronų metalų dielektrinė skvarba UV srityje nėra aiški, tad prieš pradėdant modeliavimą, nagrinėtas *Drude* ir *Drude-Lorentz* modelių pritaikomumas. Teorinės vertės palygintos su eksperimentiniais duomenimis.

Literatūros apžvalgoje pateikėme *Drude-Lorentz* modelį (1.25 lygtis), kuris atitinkamai gali būti išskaidytas į dielektrinės skvarbos menamąją ir realiąją dalis:

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + \omega_p^2 \sum_{j=0}^n \frac{f_j(\omega_{0j}^2 - \omega^2)}{(\omega_{0j}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \Gamma_j^2}, \quad (3.1)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \omega_p^2 \sum_{j=0}^n \frac{f_j \omega_p^2 \Gamma_j \omega}{(\omega_{0j}^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \Gamma_j^2}. \quad (3.2)$$

Pagal tai galime išreikšti kompleksinį lūžio rodiklį, nes žinome, kad kompleksinį lūžio rodiklį su dielektrine skvarba sieja sąryšis:

$$\hat{n} = n + i\kappa = \sqrt{\hat{\epsilon}} . \quad (3.3)$$

Išreiškiame realiąją ir menamąją lūžio rodiklio dalis:

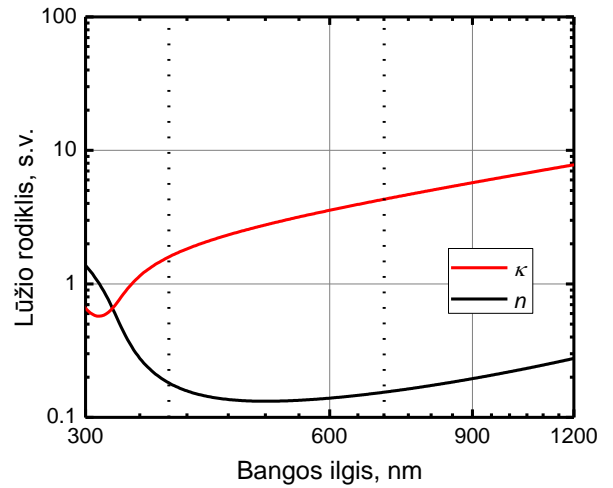
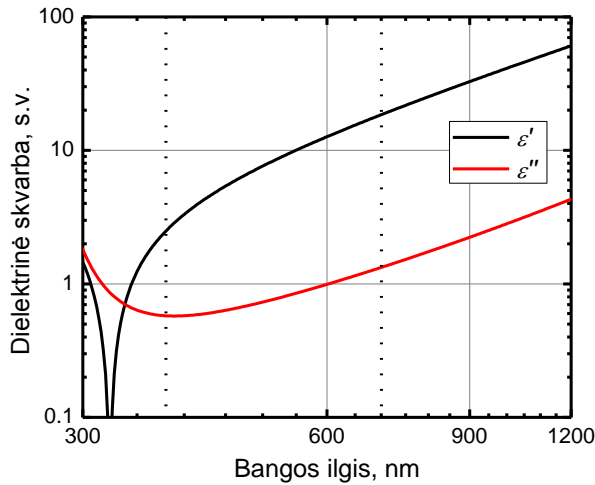
$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} \left((\epsilon'{}^2 + \epsilon''{}^2)^{1/2} + \epsilon' \right)^{1/2} , \quad (3.4)$$

$$\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \left((\epsilon'{}^2 + \epsilon''{}^2)^{1/2} - \epsilon' \right)^{1/2} . \quad (3.5)$$

Pasinaudodami 3.1, 3.2, 3.4 ir 3.5 lygtimis ir 3.1 lentelėje pateiktais *Drude-Lorentz* modelio parametrais pavaizduojame sidabro kompleksinę dielektrinę skvarbą ir lūžio rodiklį (3.1 pav.).

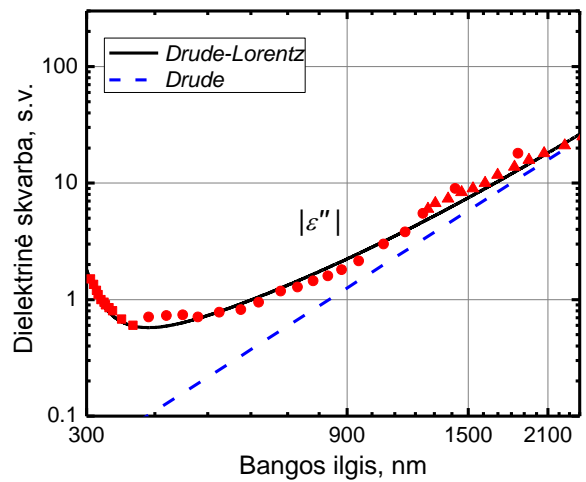
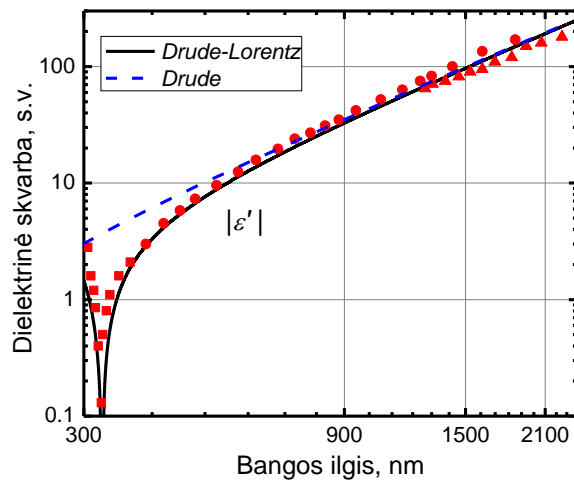
3.1 lentelė. *Drude-Lorentz* modelio parametrai dažniausiai naudojamiems metalams: sidabru (Ag), auksui (Au), aliuminiui (Al), chromui (Cr) ir variui (Cu) [33].

| | Ag | Au | Al | Cr | Cu |
|-----------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| ω_p , eV | 9,01 | 9,03 | 14,98 | 10,75 | 10,83 |
| f_0 | 0,845 | 0,760 | 0,523 | 0,168 | 0,575 |
| Γ_0 , eV | 0,048 | 0,053 | 0,047 | 0,047 | 0,030 |
| f_1 | 0,065 | 0,024 | 0,227 | 0,151 | 0,061 |
| Γ_1 , eV | 3,886 | 0,241 | 0,333 | 3,175 | 0,378 |
| ω_1 , eV | 0,816 | 0,415 | 0,162 | 0,121 | 0,291 |
| f_2 | 0,124 | 0,010 | 0,050 | 0,150 | 0,104 |
| Γ_2 , eV | 0,452 | 0,345 | 0,312 | 1,305 | 1,056 |
| ω_2 , eV | 4,481 | 0,830 | 1,544 | 0,543 | 2,957 |
| f_3 | 0,011 | 0,071 | 0,166 | 1,149 | 0,723 |
| Γ_3 , eV | 0,065 | 0,870 | 1,351 | 2,676 | 3,213 |
| ω_3 , eV | 8,185 | 2,969 | 1,808 | 1,970 | 5,300 |
| f_4 | 0,840 | 0,601 | 0,030 | 0,825 | 0,638 |
| Γ_4 , eV | 0,916 | 2,494 | 3,382 | 1,335 | 4,305 |
| ω_4 , eV | 9,083 | 4,304 | 3,473 | 8,775 | 11,18 |
| f_5 | 5,646 | 4,384 | - | - | - |
| Γ_5 , eV | 2,419 | 2,214 | - | - | - |
| ω_5 , eV | 20,29 | 13,32 | - | - | - |



3.1 pav. Sidabro dielektrinės skvarbos ir lūžio rodiklio realiosios ir menamosios komponentės, jų priklausomybė nuo bangos ilgio. Taškinėmis linijomis žymimos regimosios šviesos diapazono ribos.

Drude-Lorentz modeliu sugeneruotos vertės palygintos su eksperimentiniais duomenimis [61-63], tuo pat metu lyginant ir su *Drude* modeliu (3.2 pav.).

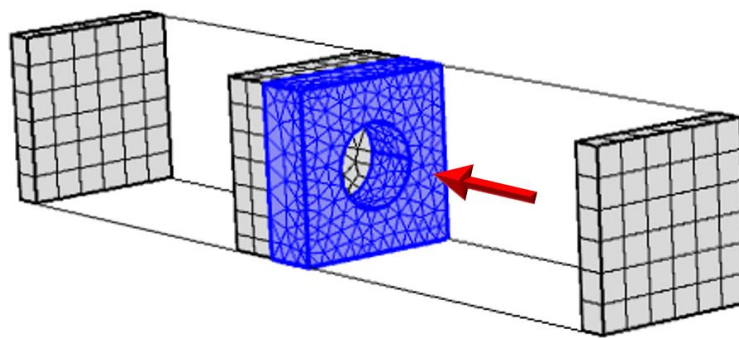


3.2 pav. *Drude* ir *Drude-Lorentz* modelio palyginimas: realioji (kairėje) ir menamoji dielektrinės skvarbos dalys (dešinėje). Medžiaga – sidabras. Grafikų taškai žymi eksperimentinius duomenis iš trijų skirtingų šaltinių [61-63], punktyrinė linija – *Drude*, o ištisinė – *Drude-Lorentz* modelio rezultatus.

Skaiciavimų metu įrodyta, kad *Drude-Lorentz* modelis išties atitinka eksperimentinius rezultatus. Priešingai nei *Drude* modelio atveju, UV srityje gan tiksliai atvaizduojamos elektronų osciliacijos. Taigi šis modelis yra tinkamas tolimesniems skaičiavimams.

3.2. EOT ir įvairių parametru įtaka

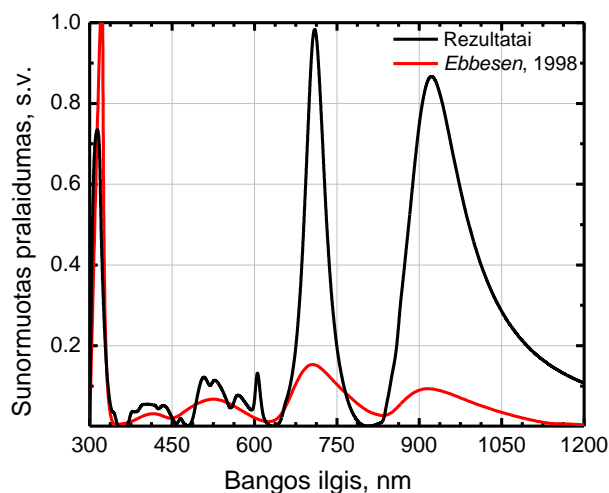
Plazmonų, taigi ir EOT, modeliavimas yra kritiškai susijęs su teisingu ribinių sąlygų ir medžiagos savybių (3.1 skyrius) nustatymu, elektromagnetinės spinduliuotės sklaidimo aprašymu. Tai atlikdami *COMSOL Multiphysics* programiniu paketu be minėtų aspektų ir geometrinio apertūros atvaizdavimo turime nurodyti elektromagnetines spinduliuotės šaltinio padėti, užfiksuoti periodines sąlygas ir savotiškais tolygiais sugėrikliais (angl. *perfectly matched layer* (PML)) prieš ir už apertūros apriboti aukštesnių eilių modas. Įvertinus visus punktus suformuojama periodinės struktūros dalis atrodo panašiai, kaip pateikta 3.3 paveiksle.



3.3 pav. Individuali apertūra iš periodinės struktūros. Šviesos sklaidimo kryptis žymima raudona rodykle, metalinė apertūra ant padėklo – mėlyna spalva, galuose – PML. Pabrėžiama, kad pavaizduotas tinklelis tik dalių skirtumui paryškinti ir nebūtinai atitinka baigtinių elementų tinklelį.

Suformavę modelį ar net gavę kažkokį sprendinį, mes negalime žinoti, kiek ir kaip gautas sprendinys atitinka realybę, kol sprendinys nėra palyginamas su eksperimentiniais rezultatais ar bendru sutarimu priimtais teoriniais pagrindais.

Thomas Ebbesen su kolegomis publikavo straipsnį [4], užfiksuojantį EOT, ir, nepaisant to, kad šiai dienai jau praėjo daugiau nei dešimtmetis, 1998 metų straipsnis vis dar yra puikiai cituojamas. Žinoma, atrodytų, kad toks citavimas natūralus, bet verta pastebėti, kad tai taip pat pabrėžia, jog straipsnyje pateikti rezultatai ir įžvalgos išliko aktualios. Tokiu požiūriu remiantis, pirmoji iškelta modeliavimo užduotis – atkartoti straipsnyje publikuotą periodinės struktūros pralaidumo spektrą. Pasirinkti tapatūs apertūros parametrai: ant kvarco padėklo užgarintoje 200 nm storio sidabro dangoje suformuotos ir kas 600 nm periodiškai išdėstytos 300 nm diametro skylės (apertūros). Pasiektas rezultatas palygintas su *Ebbesen* straipsnyje pateiktais eksperimentiniais rezultatais (3.4 pav.).



3.4 pav. Sunormuotas periodinės subbanginės apertūros pralaidumo spektras. Ant kvarco padėklo nusodintame sidabro sluoksnyje suformuotos 300 nm diametro skylės. Struktūros periodas lygus 600 nm, storis – 200 nm. Matomas geras spektro juostų pozicijų sutapimas.

Paveiksle pateiktas apytikslis sunormuotas *Thomas Ebbesen* publikuotas spektras. Baigtinių elementų metodu apskaičiuoto pralaidumo spektro juostų pozicijos puikiai sutampa su pateiktomis straipsnyje. Išskiriamos aiškios juostos ties apytiksliai 323 nm, 700 nm ir 950 nm. Taip pat išskiriamos osciliacijos nuo 400 nm iki 450 nm ir nuo 500 nm iki 630 nm, tačiau šios osciliacijos nežymios ir jų negalime taip ryškiai matyti *Ebbesen* spektre ne tik dėl apytikslų reikšmių, bet ir dėl galimai buvusių matavimo netikslumų. Priešingai nei idealiu modeliavimo atveju eksperimentuose matuojama baigtinio dydžio matrica.

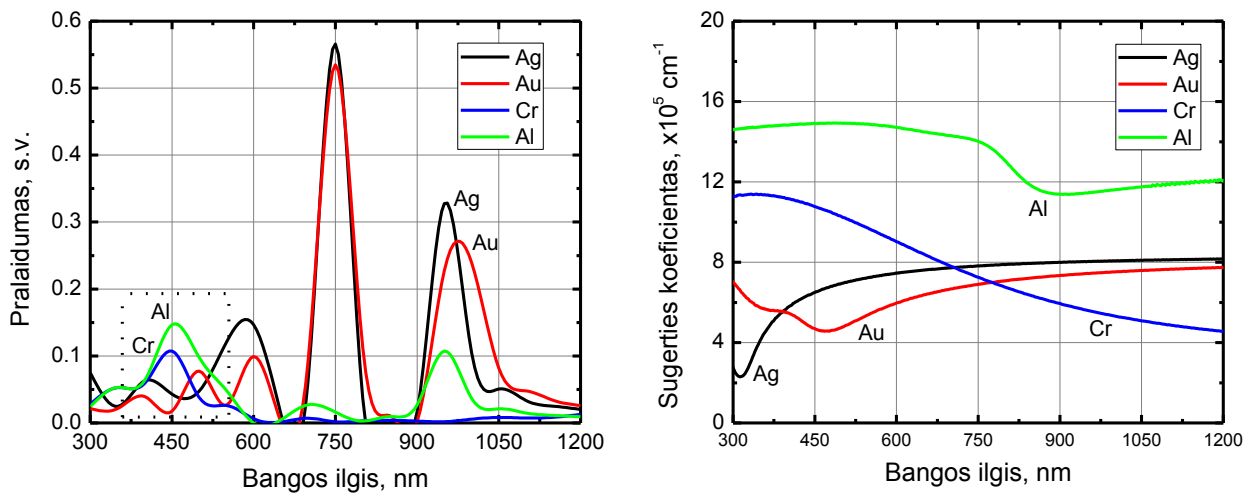
Palyginamų spektrų juostų amplitudės nėra tapačios, bet tai taip pat galime paaiškinti per skirtumus tarp idealios sistemos modeliavime ir realios eksperimentiniuose matavimuose. Eksperimentų atveju papildomai pasireiškia tokios savybės: metalo paviršiaus šiurkštumas, gamybos metu atsiradusios apnašos, metalo paviršiuje susidaręs oksido sluoksnis, suformuotų skylių netolygumas (vertikalus kūgiškumas ir horizontalus elipsiškumas), paviršinės ir vidinės pažaidos, padėklo, ant kurio užgarintas metalo sluoksnis, įtempiai, optinis pažeidimas ar modifikacija periodines struktūras formuojant lazeriu ar kitais metodais, paties metalo apsilydimo netolygumas, nevysiskai statmena skylės kraštinė, netikslus periodas ir taip toliau. Be to realiose sistemose gali varijuoti užgarinto metalo sluoksnio storis, kas, kaip pateikta 3.2.2 skyriuje, taip pat įtakoja EOT spektro juostų charakteristikas.

Dėl spektrinių juostų atitikimo pirminiuose modeliavimo rezultatuose galime teigti, jog sukurtas modelis yra tinkamas šviesos sklidimo per tokias struktūras skaičiavimui, tad galimas tolimesnių užduočių vykdymas pasinaudojant šiuo modeliu. Šios užduotys tapatinamos su įvairių parametrų įtaką EOT: medžiaga, iš kurios pagaminta apertūra, pačios apertūros storis, aktyvusis plotas, forma, elektromagnetinės spinduliuotės kritimo kampas bei apertūrą supanti aplinka.

3.2.1. Medžiagos pasirinkimas

Užgarinti kelių šimtų nanometrų metalinę dangą ar net suformuoti tokio storio foliją nebėra didelis technologinis iššūkis, tad subbanginių apertūrų gamyboje galime pasirinkti daugybę skirtingų medžiagų.

Kiekvienas metalas turi savo specifinių savybių, nuo kurių priklauso šviesos sklidimas per juos. Iš 3.1 lentelės be jau tirtu sidabro pasirinktas auksas, chromas ir aliuminis. Šių metalų dielektrinės funkcijos išreikštos per prieš tai patvirtintą *Drude-Lorentz* modelį ir elektromagnetinei spinduliuotei sklindant per apertūras stebėtas EOT (3.5 pav.).

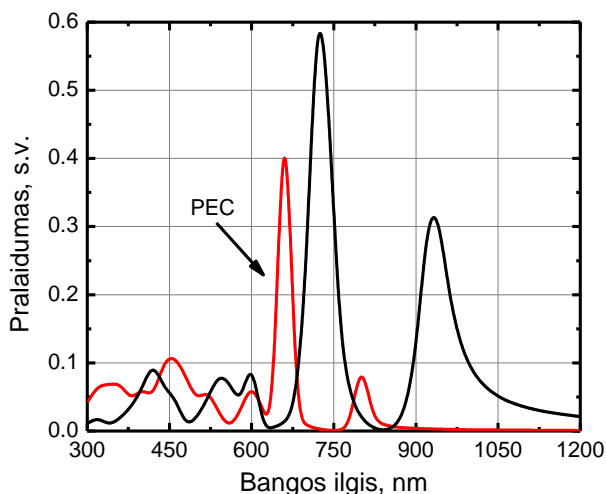


3.5 pav. Periodinių apertūrų pralaidumo (kairėje) ir tiriamų metalų sugerties koeficientų (dešinėje) priklausomybė nuo spinduliuotės bangos ilgio.

Sugerties koeficiento kitimas pavaizduotas neatsitiktinai. EOT juostų amplitudės slopsta didėjant medžiagos sugerčiai: metalų apertūrų pralaidumų santykiai 3.5 paveikslo kairiajame grafike taškiniu apvažu išskirtoje srityje (ties 450 nm) net tiesiogiai proporcingi jų sugerties koeficientų santykiui.

Didžiausias EOT stebimas sidabro ir aukso atveju. Be to pagal pralaidumo spektrus galime teigti, jog sidabro ir aukso skirtumai nėra ženklūs, tad renkantis vieną ar kitą metalą galimoms EOT prietaikoms, spektrinių juostų pozicijos nebūtinai bus lemiamas veiksnys. Priešinga situacija su kitais metalais, nes jų spektrai stipriai skiriasi: jei aliuminio atveju dar matosi būdingosios juostos ties apytiksliai 700-750 nm ir 900-1000 nm, tai chromo spektre jų galime neįskaityti. Šiuo atžvilgiu chromas geriausiu atveju galėtų būti naudojamas, kaip filtras, praleidžiantis didesnio dažnio spinduliuotę, tačiau nėra taikytinas regimojoje srityje.

Kitas svarbus modeliavimo aspektas, metalo sluoksnio laidumo įvertinimas. Dažnai modeliavime metalas pasirenkamas kaip idealus laidininkas (angl. *perfect electric conductor* (PEC)) [64], bet tokiu atveju apskaičiuotame spektre matomas mėlynasis poslinkis ir juostos amplitudės sumažėjimas (3.6 pav.), tad PEC toliau naudotas nebus.

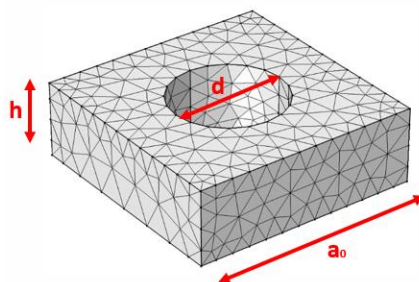


3.6 pav. Subbanginių periodinių apertūrų pralaidumo spektrai esant idealaus laidininko (PEC) nustatymui ir nurodant nuostolius pagal dielektrinės skvarbos funkciją.

Tolimesniuose teorinių skaičiavimų ir analizės skyriuose dėl paprastumo bus nagrinėjamos periodinės subbanginės apertūros, suformuotos iš ženkliai EOT pasižymintio sidabro.

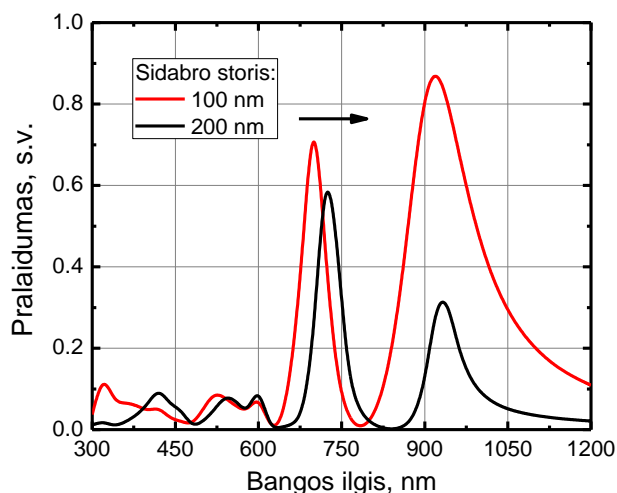
3.2.2. Apertūros geometriniai dydžiai įtaka

Bazinių priklausomybių nustatymui pasirinkta skylinė, kitaip skritulinė, apertūra (3.7 pav.). Nagrinėtas tokių sidabro dangoje suformuotų subbanginių apertūrų matricos optinis pralaidumas keičiant apertūros geometrinius dydžius: aukštį (h), atitinkantį sidabro sluoksnio storį, – 3.8 pav., skylės diametrą (d) – 3.9 pav. ir periodą (a_0) – 3.10 paveikslas.



3.7 pav. Periodinių apertūrų matricos vienetinė dalis. Analizuojami geometriniai dydžiai: aukštis (h), kas atitinka metalo sluoksnio storį, šoninė kraštinė (a_0), atitinkanti periodą, ir skylės diametras (d).

Didinant sidabro (ar kitų metalų) sluoksnį optinio pralaidumo spektras slenkasi į ilgesniųjų elektromagnetinių bangų sritį. Kitaip tariant, didėjant apertūrų storiui yra matomas raudonasis poslinkis (angl. *red-shift*). Taip pat, didėjant šiam geometriniam parametru, dėl medžiagos sugerties ir kitų nuostolių, mažėja šviesos pralaidumas. Palyginimui 3.8 paveiksle pateiktas skirtingų storių (100 nm ir 200 nm) sidabro sluoksnio subbanginių periodinių skylės formos apertūrų pralaidumas.

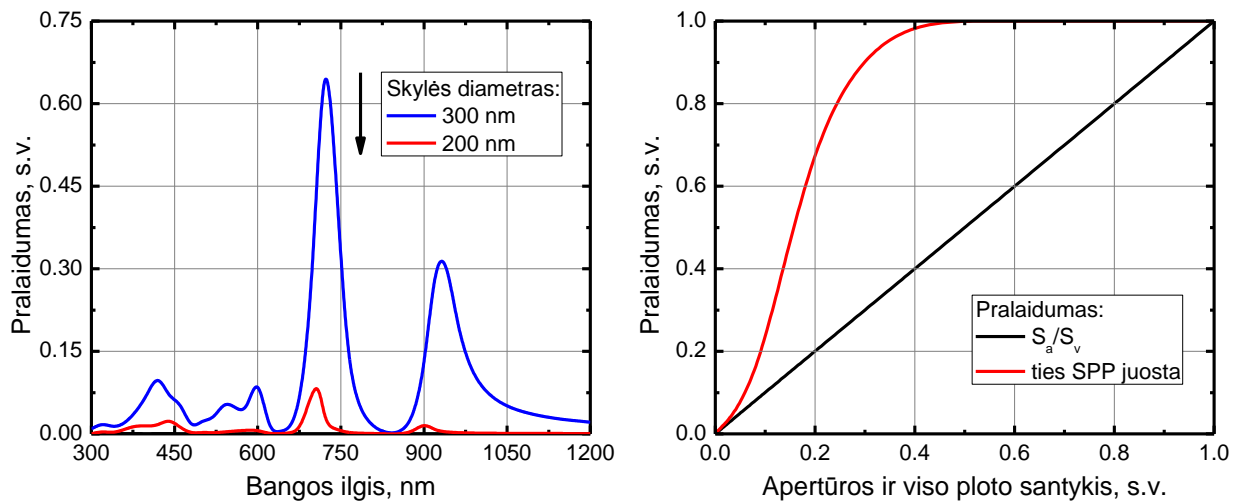


3.8 pav. Optinio pralaidumo spektras keičiant apertūros aukštį (metalo sluoksnio storį). Sidabro sluoksnyje suformuotos 300 nm diametro skylės. Struktūros periodas lygus 600 nm. Matomas raudonasis poslinkis didėjant sluoksnio storiui.

Įdomios tendencijos matomos ir keičiant apertūros diametrą (3.9 pav.). Verta pastebėti, kad keičiant skylės formos apertūros diametrą, bet išlaikant kitus geometrinius dydžius (ypatingai, periodą), tuo pat metu keičiamas ir apertūros aktyviojo ploto (skylių) santykis su visu metalo sluoksnio paviršiaus plotu:

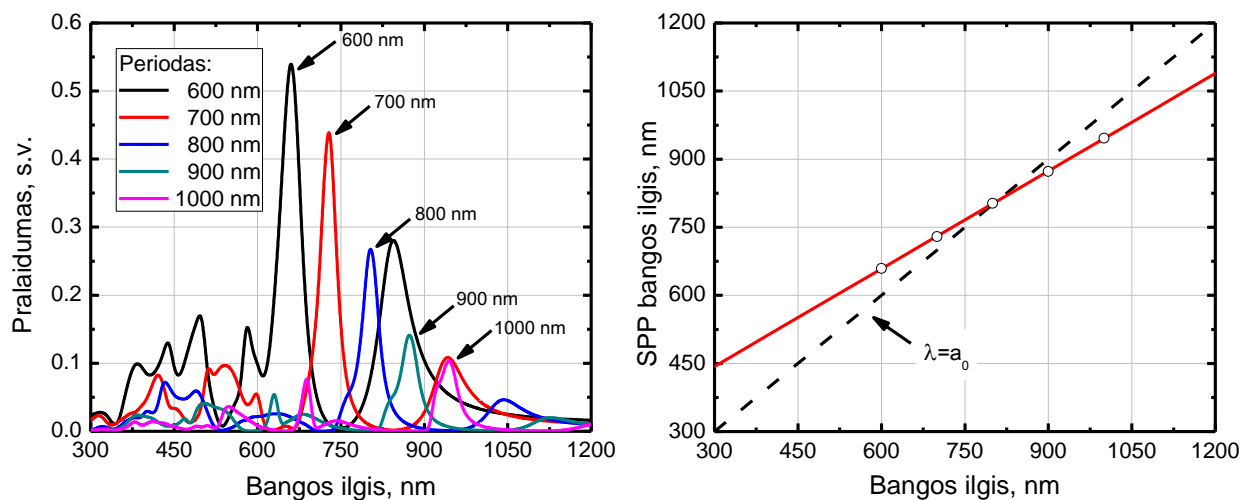
$$T = \frac{S_{\text{apertūros}}}{S_{\text{visas}}}, \quad (3.6)$$

kas atitinka ribinį apertūros pralaidumą. Atsižvelgiant į tai, šį santykį galima palyginti su EOT fenomenu: visos pralaidumo vertės, ties tomis pačiomis sąlygomis viršijančios minėto santykio vertes, bus tolygios sustiprintam pralaidumui. Efektyviam EOT reikalingas apytiksliai bent 0,1 plotų santykis, o visiškas pralaidumas stebimas apertūrai užimant tik pusę viso ploto. Apertūrų pralaidumo kitimas keičiant apertūros ir viso ploto santykį pavaizduotas 3.9 paveiksle.



3.9 pav. Optinio pralaidumo spektrai, keičiant apertūros diametrą: 200 nm ir 300 nm diametro apertūrų pralaidumų spektrai (kairėje) bei pralaidumo priklausomybė nuo aktyvaus apertūros ir viso ploto santykio (dešinėje), kur reikšmės virš tiesės – EOT.

Pagal 1.38 lygtį, gardelės periodas a_0 yra labai svarbus koeficientas numatantis plazmonų rezonansų pozicijas, taigi ir spektro juostų padėtis. Kitimas turi būti tiesinis ir tas, sprendžiant pagal (1, 0) modą yra sėkmingai atkartojamas 3.10 pav.

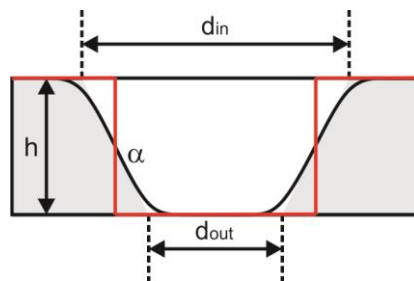


3.10 pav. Optinio pralaidumo spektras keičiant apertūrų matricos periodą: iš viršaus į apačią atitinkamai 600 nm, 700 nm, 800 nm, 900 nm ir 1000 nm periodo apertūrų pralaidumo spektrai (kairėje), kai kiti parametrai (skylės diametras ir periodas) nekeičiami, bei SPP juostos (1, 0) kitimas (dešinėje).

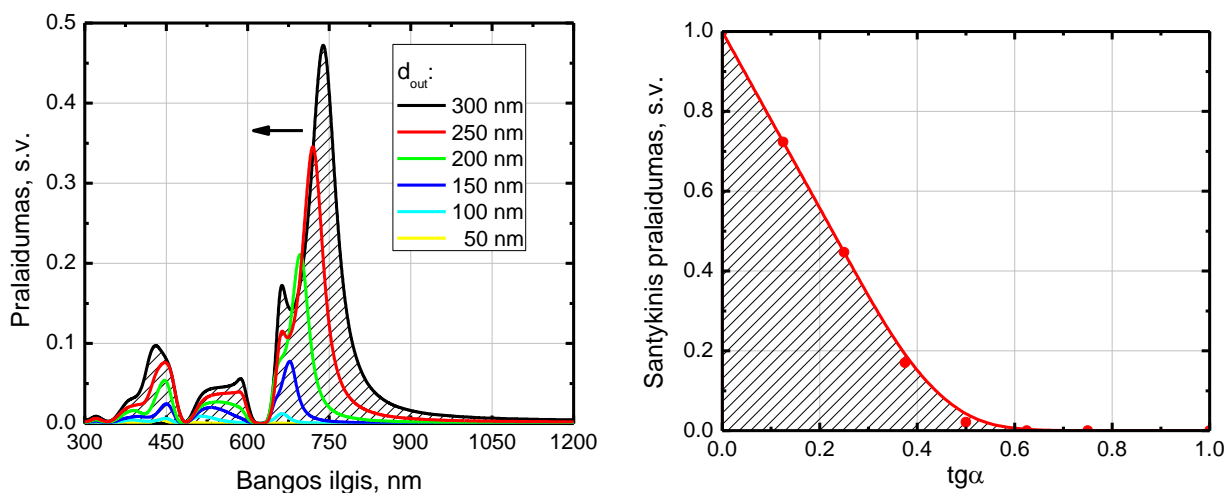
3.2.3. Apertūrų formos ir skylių kūgiškumo įtaka

Subbanginių periodinių apertūrų pralaidumo spektrus priklausomai nuo skylės formos apertūrų geometrinių dydžių aptarėme 3.2.1 skyriuje, tačiau realios apertūros formuojamos lazerio spinduliuote pasižymi ne idealia forma. Kadangi įprastas lazerio spinduliuotės pluošto

intensyvumas pasižymi *Gauss* skirstiniu, tai neišvengiamai net ir interferenciniu metodu pažeidimas stipriausias centrinėje pluošto dalyje, o kraštuose bus matomas netolygus apsididimas (pluošto formos ir pažeidimo pavyzdys pateiktas 1.10 iliustracijoje). Kitaip tariant, suformuojamos skylės bus netolygios, kraštai ne statmeni – skylės pasižymės kūgiškumu (3.11 pav.).



3.11 pav. Skylės formos apertūros skerspjūvis. Raudonomis statmenomis linijomis žymima ideali forma, o kampo α tangentu aprašomas apertūros kūgiškumas, d_{in} ir d_{out} – skylių diametrai paviršiuose.

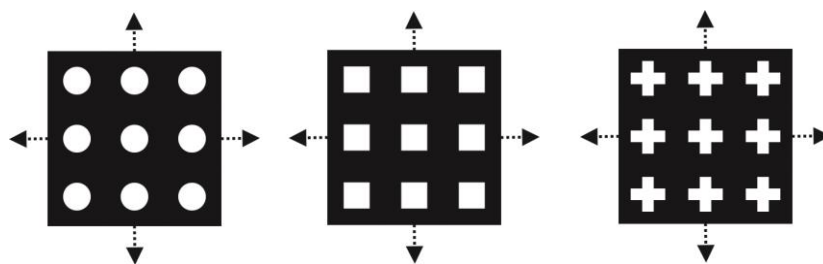


3.12 pav. Pralaidumo spektrai didėjant kūgiškumo parametrai: šviesos įėjimo skylėi išliekant tokiai pačiai, bet mažėjant išėjimo skylėi nuo 300 nm iki 50 nm (kairėje) ir pagrindinės plazmonų juostos (1, 0) kitimas priklausomai nuo kūgiškumo parametro (dešinėje). Sidabro storis – 200 nm.

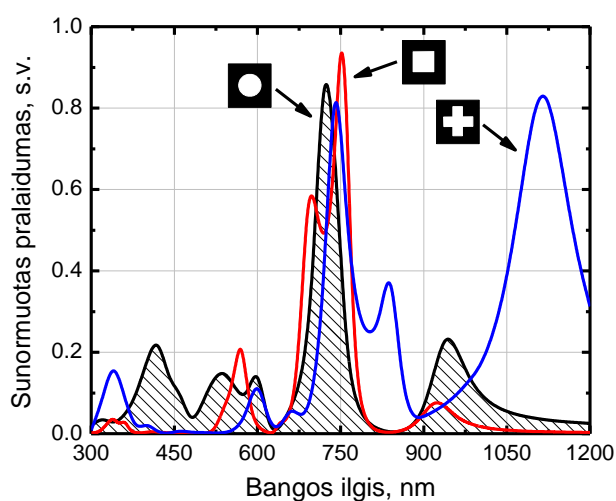
Kaip matome iš 3.12 paveikslo, ne idealus struktūrizavimas gali įtakoti pralaidumą. Tai nesudaro didelio pokyčio juostos pozicijos atžvilgiu, bet išėjimo skylės diametrai sumažėjus dvigubai (iš 300 nm į 150 nm, kūgiškumo koeficientas apytiksliai 0,4), juostos intensyvumas krinta kubu, tai yra net 6 kartus. Taigi apertūrų formavimo būdas nedarys įtakos plazmonų juostų pozicijoms, tačiau gali stipriai įtakoti bet kokio pritaikymo galimybes.

Taip pat atlikti modeliavimo bandymai keičiant apertūrų formą, siekiant nustatyti koks yra plazmonų rezonanso jautrumas horizontalios plokštumos atžvilgiu. DLIP metodas skirtingų struktūrų formavimo atveju yra ribotas, tačiau keisdami intensyvumą ar darydami nedidelius poslinkius galime pasiekti submikroninio dydžio stačiakampius ir net kryželių formos pažeidimus

[24, 65], kas pavaizduota 3.13 paveiksle. COMSOL Multiphysics programiniu paketu sumodeliuotų šių apertūrų sunormuoti spektrai pateikti 3.14 paveiksle.



3.13 pav. Skirtingi apertūrų tipai. Pateiktos cilindrinė skylių, kvadratinė ir kryžiaus formos apertūrų matricos.



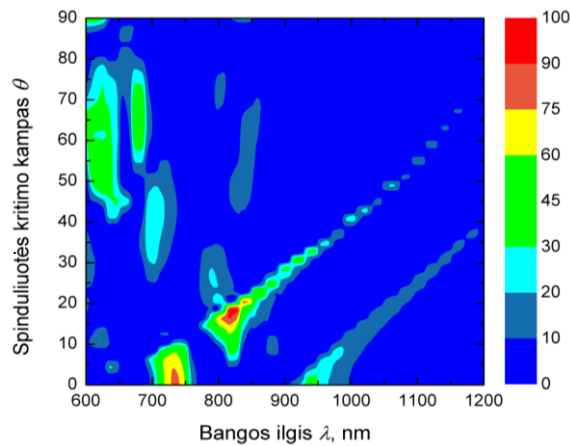
3.14 pav. Sunormuoti pralaidumo spektrai keičiant apertūrų formą. Suformuoti to paties paviršiaus ploto skylės, kvadrato ir kryželio formos dariniai.

Keičiant formą, bet išlaikant periodą, *Wood* anomalijų pozicijos nekinta. Cilindrinė ir stačiakampė (kvadratinė) skylių pralaidumo spektrai pagrindinės plazmonų modos (1, 0) atžvilgiu taip pat skiriasi nežymiai. Priešingai nei skylės, kvadratinių ir kryžių spektrus įtakoja poliarizacija [10]. Nepaisant to, formuojant apertūras, nepasiekus idealių kampų, didelio skirtumo nesimatys, nebent specifiniams taikymams reikalingas didelis tikslumas.

3.2.4. Priklausomybė nuo spinduliuotės kritimo kampo

Šviesos pralaidumo priklausomybei nuo krintančios spinduliuotės kampo atvaizduoti sudarytas paviršinis žemėlapis (3.15 pav.). Iš šio žemėlapio matome, kad spektro juostų pozicijas, galime kontroliuoti, keisdami kampą, tačiau ryškaus juostos, esančios apytiksliai ties 720 nm, poslinkio nematome mažų kampų (nuo 0 iki 5 laipsnių) zonoje. Taip pat įdomus artefaktas

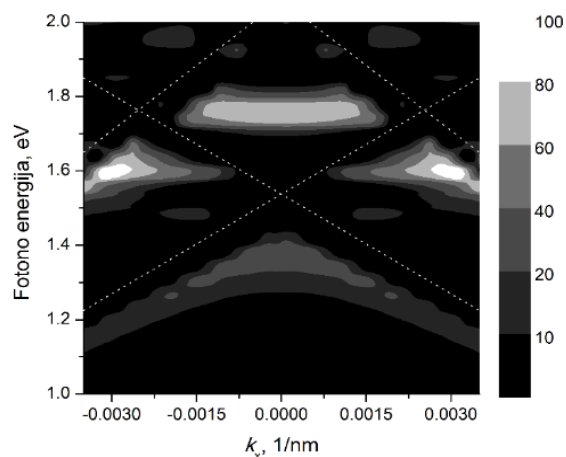
matomas ties lygiagrečiu (bandinio atžvilgiu) šviesos sklidimu, kuomet pralaidumas fiksuojamas tik ties gardeles konstanta (apertūrų periodo).



3.15 pav. Šviesos pralaidumo priklausomybė nuo bangos ilgio ir spinduliuotės kritimo kampo. Diagrama žymi pro apertūra prasklidusios šviesos intensyvumo procentinę dalį. Statmenas šviesos kritimas – 0° , lygiagretus bandinio paviršiui – 90° .

Šviesos pralaidumo kitimas nuo bangos ilgio ir spinduliuotės kritimo kampo nėra visiškai tiesinis, tad detalesnei analizei apskaičiuojame dispersiją:

$$k_x = k_0 \sin \theta = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta . \quad (3.7)$$

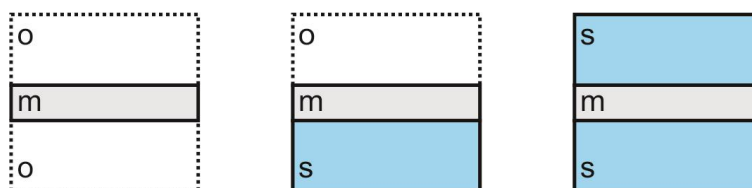


3.16 pav. Paviršiaus plazmonų energijos dispersija. Tamsios zonos žymi minimalias gardeles pralaidumo vertes, tiksliau plazmonų juostų nėra, o šviesos – plazmonų juostas.

Pasiektas dispersijos vaizdas (3.16 pav.) yra tapatus pateiktam literatūroje [5]. Kaip numanoma, kitimas nėra tolygus dėl gan ryškių gardeles difrakcijos (*Wood* anomalijų [1]) ir jau ne kartą minėtų plazmonų modų.

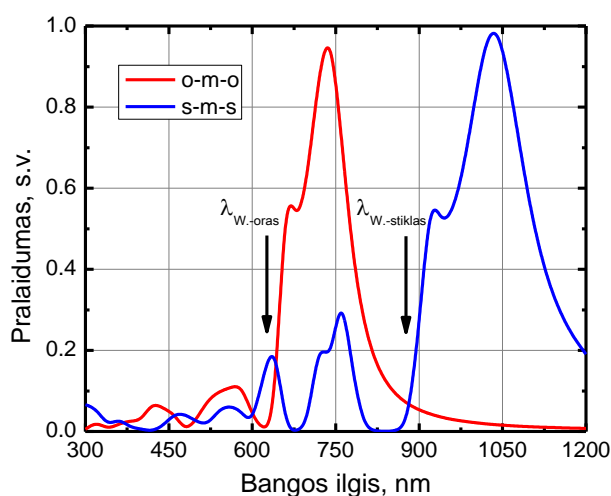
3.2.5. Aplinkos įtaka

Elektromagnetinei spinduliutei krintant į subbangines periodines apertūros SPP juostos bangos ilgis išreiškiamas 1.47 lygtimi, kurioje įskaitoma tiek metalo dielektrinė funkcija, tiek jį supančios aplinkos dielektrinė skvarba. Paviršiaus plazmonų poliaritonai, kaip pateikta 1.3 skyriuje, formuojasi metalo ir dielektrinės skvarbos sandūroje. Dažniausiai metalo apertūrą supanti aplinka yra oras, stiklo padėklas ar kitos panašios medžiagos (3.17 pav.).



3.17 pav. Metalo sluoksnio (apertūros) ir jį supančių aplinkų konfigūracijos: oras-metalas-oras (o-m-o), oras-metalas-stiklas (o-m-s), stiklas-metalas-stiklas (s-m-s).

Atitinkamai nagrinėta oro ir stiklo įtaka apertūroms pagamintoms iš plono 200 nm sidabro sluoksnio. Konfigūracijos, kaip pateikta 3.17 paveiksle, nėra sudėtingos, tačiau plazmonų rezonanso bangos ilgio skaičiavimas nėra trivialus, nes turi būti skaičiuojama kompleksinė ir nuo krintančios spinduliuotės bangos ilgio priklausanti funkcija. Priešingai su difrakcines gardeles modomis, tai yra *Wood* anomalijomis (1.48 lygtis), kurios priklauso tik nuo aplinkos. Dielektrinės aplinkos lūžio rodiklis, kaip atitinkamai ir skvarba, yra pastovus dydis: oro – 1, stiklo – apytiksliai 1,45. Pirmosios eilės difrakcijos modos pateiktos 3.18 paveiksle, kai kurios regimajame diapazone matomos aukštesniųjų eilių modos pateiktos 3.2 lentelėje.

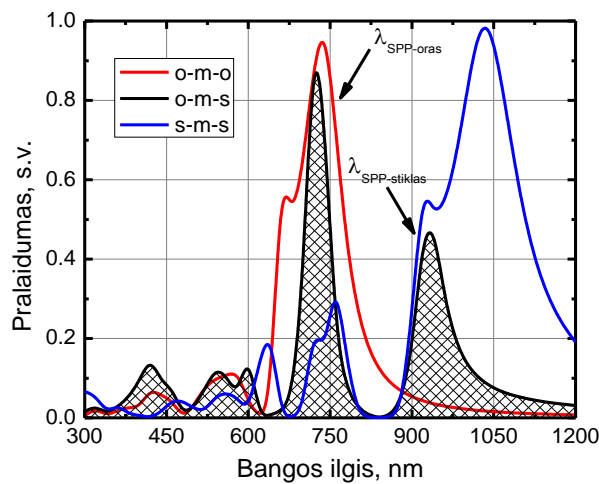


3.18 pav. Apertūrų pralaidumo spektrai jas gaubiant tik oru arba tik stiklu (600 nm periodo skylės 200 nm sidabro sluoksnyje). Rodyklėmis nukreipiama į pirmosios eilės (1, 0) *Wood* anomalijas.

3.2 lentelė. Apskaičiuotos *Wood* anomalijų modos 600 nm periodo apertūroms.

| | (1, 0) | (1, 1) | (2, 0) | (2, 1) |
|-----------------|--------|--------|--------|--------|
| Oras-metalas | 600 nm | 424 nm | 300 nm | 268 nm |
| Stiklas-metalas | 870 nm | 615 nm | 435 nm | 389 nm |

Tiek *Wood* anomalijų, tiek pačių plazmonų aukštesnių eilių modos spektre pasireiškia, tačiau jų įtaka slopsta augant modos skaičiui. Pagrindinė periodinių subbanginių apertūrų SPP juosta (1, 0) tikimasi panaudoti jutiklių taikymams, nes ji bent kelis kartus didesnė už tolimesnes modos ir ties ja stebimas maksimalus pralaidumas. Verta pastebėti, kad šiai juostai aplinkos įtaka taip pat matoma ir pagal tai galima nustatyti spektrų skirtumus tarp stiklo ir oro (3.19 pav.).



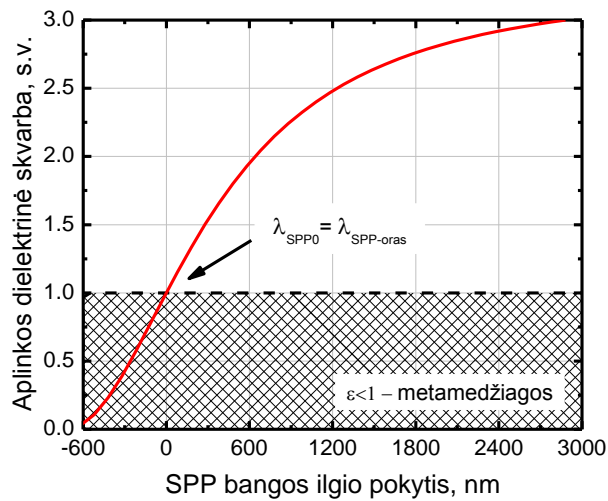
3.19 pav. Apertūrų pralaidumo spektrai esant skirtingoms aplinkos konfigūracijoms (600 nm periodo skylės, sidabras). Oro ir stiklo indeliai į bendro tipo (o-m-s) konfigūraciją žymimi rodyklėmis.

Taip pat 3.19 pav. matome, kad SPP vyksta abiejuose metalo paviršiuose, tiksliau, abiejuose sandūrose su dielektrikais. Natūralu, jog pirmojo paviršiaus (į kurį krinta šviesa) įtaka yra didesnė, antrojo paviršiaus signalas yra šiek tiek pasislinkęs į žemesniųjų bangų pusę.

Išmatavę ar sumodeliavę vieną spektrą, galime preliminariai numatyti jo pokytį keičiant ne tik periodą (žr. 3.2.2 skyrių), bet ir aplinką. Pasinaudojant 1.47 lygtimi, sudaryta lygčių sistema ir išvesta lygtis, pagal kurią, renkantis medžiagą su tam tikru lūžio rodikliu galima paslinkti rezonansines juostas į norimą sritį. Tam gali būti naudojami įvairūs imersiniai skysčiai ar kitos medžiagos, kurių dielektrinė skvarba būtų lygi:

$$\varepsilon_{d1} = \left(\frac{1}{\varepsilon_{d0}} + a_0^2 \left(\frac{1}{\lambda_{SPP1}^2} - \frac{1}{\lambda_{SPP0}^2} \right) \right)^{-1}, \quad (3.8)$$

čia ε_{d0} ir λ_{SPP0} žinomi parametrai, pirminės aplinkos dielektrinė skvarba ir išmatuoto ar sumodeliuoto spektro rezonansinės juostos padėtis (etalonas), a_0 – struktūros periodas, o λ_{SPP0} yra norima juostos padėtis. Šiuo atveju (3.19 pav.) pasirinkta ryškiausia juosta ties 720 nm, kuri atitinka oro-metalo sandūros SPP juostą, ir apskaičiuotas naujos aplinkos dielektrinės skvarbos poreikis, norint pasiekti konkretų juostos poslinkį (3.20 pav.).



3.20 pav. Aplinkos dielektrinė skvarba pagal SPP bangos ilgio pokytį, turint etaloninį 600 nm periodo apertūrų sidabro bandinyje pralaidumo spektrą, kai pradinis taškas – oro-metalo plazmonų juosta ties 720 nm. Oro dielektrinė skvarba lygi 1.

Keičiantis aplinkos dielektrinei skvarbai, SPP bangos ilgio pokytis yra labai jautrus, tačiau toks aplinkos įtakos stebėjimas gali būti naudingas jutiklių prietaikoms. Tai yra, turėdami periodinių apertūrų etaloninį SPP bangos ilgį, užlašinę ar kitaip pridėję naują medžiagą, užfiksuojuame poslinkį dėl pakitusios dielektrinės skvarbos. Tuomet pagal apskaičiuotą dielektrinę skvarbą pasinaudodami medžiagų duomenų baze sėkmingai identifikuojame naująją medžiagą.

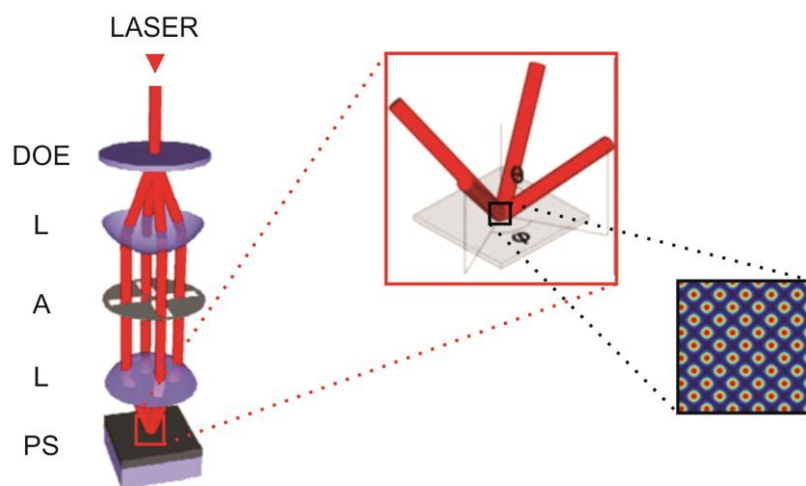
4. Eksperimentinė įranga ir medžiagos

Eksperimentų metu DLIP buvo atliekamas didelės impulso energijos pikosekundiniu lazeriu *Atlantic HE* (UAB „Ekspla“). Dalis lazerinės sistemos parametrų pateikta 4.1 lentelėje. Pavieniais impulsais, kurių pasikartojimo dažnis 1000 Hz, o maksimali 532 nm bangos ilgio impulso energija lygi 1,3 mJ, buvo formuojami didelio ploto periodiniai pažeidimai. Interferencine optine sistema (4.1 pav.) su keturiais išskaidytais pluoštais buvo pasiektas 600 nm struktūrų periodas.

Subbanginės periodinės struktūros formuotos ant padėklo užgarintų skirtingų metalų sluoksnių. Tikslus pluoštų suvedimas, taigi ir interferencinis vaizdas ant bandinio paviršiaus, pasiektas bandinio atžvilgiu keičiant optinės sistemos koordinatas vertikalia ašimi. Bandinio pozicionavimas atliktas *SCA* programa (UAB „Altechna“) valdant *Aerotech Ltd.* pozicionavimo stalą.

4.1 lentelė. Eksperimentinės lazerinės sistemos parametrai.

| Parametras | Vertė |
|--------------------------------------|---------------------|
| Bangos ilgis | 532 nm |
| Impulso trukmė | 300 ps |
| Impulsų pasikartojimo dažnis | 1000 Hz |
| Maks. impulso energija (ties 532 nm) | 1,3 mJ |
| Lęšių (L) židinio nuotoliai | +200 mm ir +12,5 mm |
| DOE difrakcinis kampas | 5° |

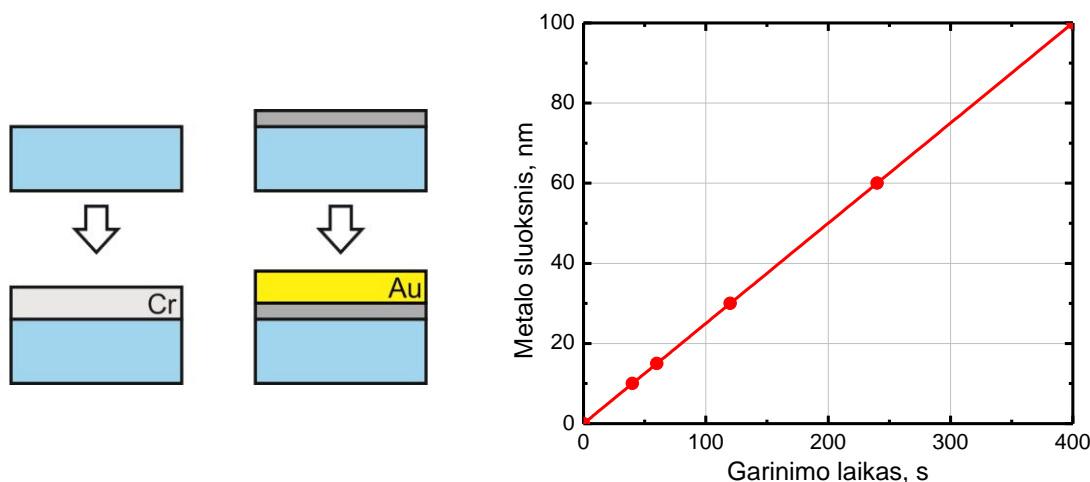


4.1 pav. Eksperimentų metu naudota optinė sistema tiesioginiam lazeriniam interferenciniam struktūrizavimui: lazerio pluoštas išskaidomas difrakciniu optiniu elementu (DOE), išskaidyti pluoštai krinta į konfokalinę lęšių sistemą (L – lęšis, A – apertūra), kuria suvedami į vieną tašką ant pozicionavimo stalo (PS) esančio bandinio paviršiaus taip suformuojant interferencinį vaizdą.

Aukso dangos, kuriose eksperimentų metu buvo formuojamos apertūros, buvo dengtos specialiu *Quarum Technologies Ltd.* metalų dulkinimo įrenginiu *Q150T*. Priklausomai nuo dengimo laiko ant stiklo ar kito padėklo (safyro, silicio) suformuojama norimo storio danga (4.2 pav., dešinė). Dėl prasto dangos adhezijos tolimesniuose eksperimentų etapuose (plačiau apie tai eksperimentiniuose rezultatuose) lazerio poveikio zonoje buvo matomas dangos sutrūkinėjimas ir atitrūkimas nuo padėklo. Tokiu atveju periodinėms struktūroms susiformuoti neįmanoma, nes medžiaga pašalinama ne pagal interferencinį intensyvumo pasiskirstymą, o iš visos poveikio zonos. Be aukso (Au), eksperimentai atlikti su skirtingo storio chromo (Cr) ir niobio (Nb) dangomis. Aukso, chromo ir kai kurių kitų plonų metalo sluoksnių adhezijos pateiktos literatūroje (4.2 lentelė). Niobio similiarios informacijos užfiksuoto nebuvo, tačiau pažymima, kad niobis prikimba prie stiklo geriau nei auksas [66]. Kaip matome lentelėje, priešingai nei chromo atveju, dengiant auksą reikalingas papildomas sukibimą skatinantis sluoksnis (4.2 pav., kairė).

4.2 lentelė. Metalų sluoksnių medžiagų savybės: adhezija prie stiklo [67] ir šiluminės savybės [68].

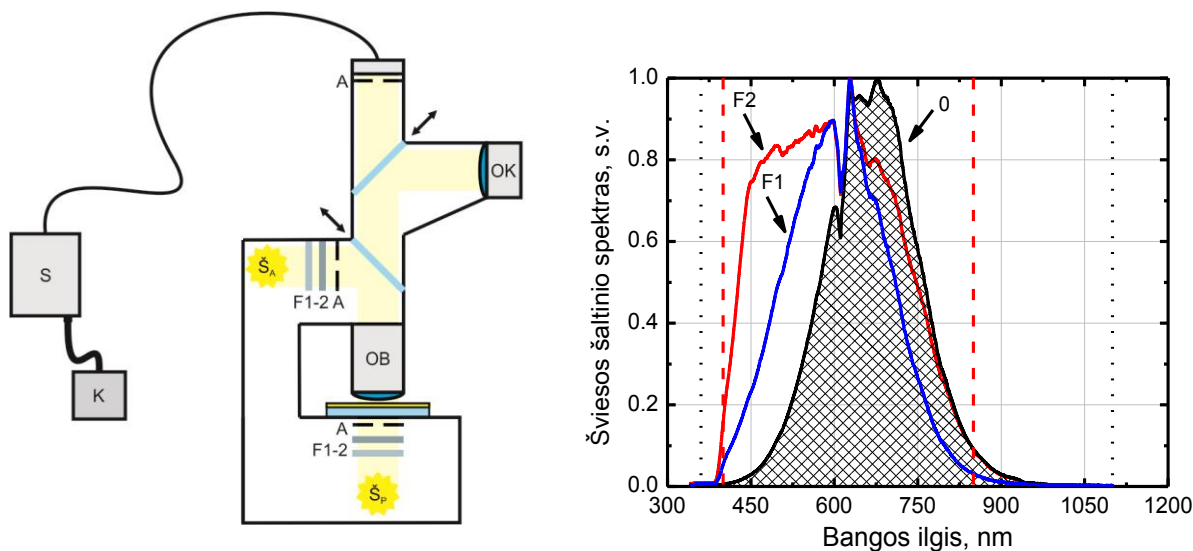
| | Auksas (Au) | Chromas (Cr) | Niobis (Nb) |
|--|-------------|--------------|-------------|
| Adhezija, s.v. | 2 | 150-500 | - |
| Tankis, 10^6 g/m^3 | 19,2 | 7,19 | 8,58 |
| Savitoji šiluma, $\text{J}/(\text{g } ^\circ\text{C})$ | 0,129 | 0,449 | 0,269 |
| Lydimosi temperatūra, $^\circ\text{C}$ | 1064 | 2408 | 1857 |
| Lydimosi šiluma, J/g | 63 | 331 | 285 |
| Garavimo temperatūra, $^\circ\text{C}$ | 2856 | 2671 | 4744 |
| Garavimo šiluma, J/g | 1670 | 5468 | 7500 |
| Šiluminis laidumas, $\text{W}/(\text{m K})$ | 315 | 90,3 | 53,7 |



4.2 pav. Metalo sluoksnių, šiuo atveju chromo ir aukso, dangos be ir su plonu tarpiniu sluoksniu geram sukibimui pasiekti (kairėje) ir dangos garinimo sparta (dešinėje).

Suformuotos periodinės subbanginės struktūros analizuotos optiniu bei skenuojančiu elektronų mikroskopu (SEM). Orientacinis struktūrų periodas lygus 600 nm, tad optiniu mikroskopu galima dirbti tik santykinėje makro skalėje, tai yra stebint visą interferencinę dėmę ir bendru atveju matant ar struktūros apskritai formuojasi. Tačiau, kokios formos ir kokybės struktūros formuojamos (apertūros ar metalo salelės), galime pasakyti tik kitais metodais. Metalinės dangos storiai matuoti profilometru, apertūrų tolygumas poveikio zonoje – atominės jėgos mikroskopu (angl. atomic force microscope (AFM)). AFM plačiai naudojamas medžiagos paviršiaus topologijai nustatyti. Tai metodas, kuriuo nanometrinių matmenų adata (zondų) detektuojamos *Van der Waals* jėgos priepaviršinėje medžiagos zonoje. Tokiu būdu galime išmatuoti bandinio šiurkštumą, fizinių apertūrų (metalo sluoksnio) storį [69].

Subbanginių apertūrų pralaidumo matavimai atlikti prie optinio mikroskopo prijungus spektrometrą *AvaSpec-ULS2048*, kuriuo, priklausomai nuo pasirinkto mikroskopo šviesos šaltinio, registruojamas pralaidumo arba atspindžio spektras. Objektivu surinkta šviesa stebima per okuliarą geram bandinio pozicionavimui užtikrinti ir šviesolaidžiu perduodama į spektrometrą. *Avantes Ltd.* spektrometro teorinės matavimo ribos yra nuo 360 nm iki 1100 nm, tačiau realios dėl gero triukšmo/signalų santykio tik nuo 400 iki 800 nm, tačiau to pakankama orientuojantis į regimosios srities spektrą (4.3 pav.).



4.3 pav. Spektrų matavimo sistema prie optinio mikroskopo šviesolaidžiu prijungus

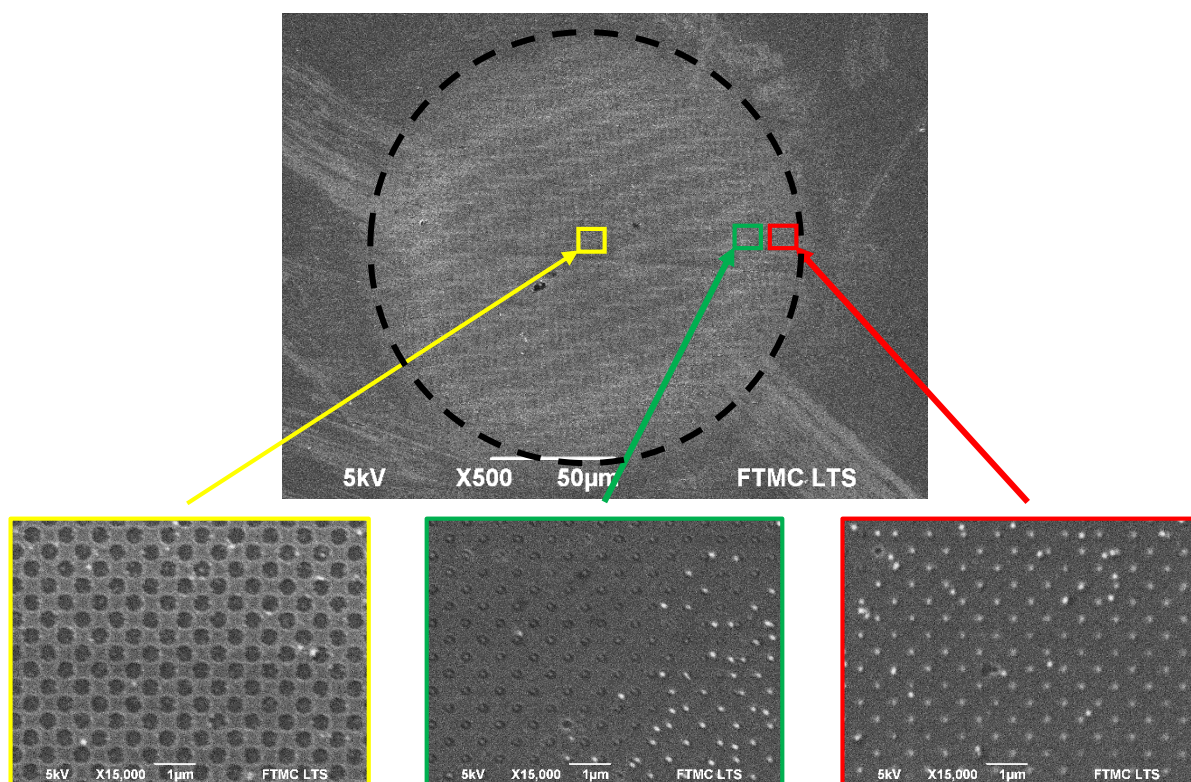
spektrometrą (kairėje) ir šviesos šaltinio spektras derinant filtrus (dešinėje), kur žymimos teorinės spektrometro (vertikalios taškinės linijos) ir šaltinio (vertikalios brūkšninės linijos) matavimo ribos. Kiti žymėjimai: \check{S}_p ir \check{S}_a – šviesos šaltiniai pralaidumo ir atspindžio matavimams, F1-2 – filtrai, A – apertūra, OB – objektyvas, OK – okuliaras, S – spektrometras, K – kompiuteris.

5. Eksperimentiniai rezultatai

Darbo metu DLIP metodu formuotos periodinės subbanginės struktūros: derintas lazerio pluošto intensyvumas norimoms 600 nm periodo apertūroms pasiekti bei tirtos pažeidimų priklausomybės nuo impulsų kiekio ir kitų sistemos parametrų. Taip optimizuotas lazerinio proceso efektyvumas. Ištirtas interferencinio metodo veiksnumas skirtingiems metalų sluoksniams. Sėkmingai suformavus periodines apertūras, atlikta jų analizė: topologijos matavimas ir optinio pralaidumo tyrimas.

5.1. Interferencinio pažeidimo tolygumas

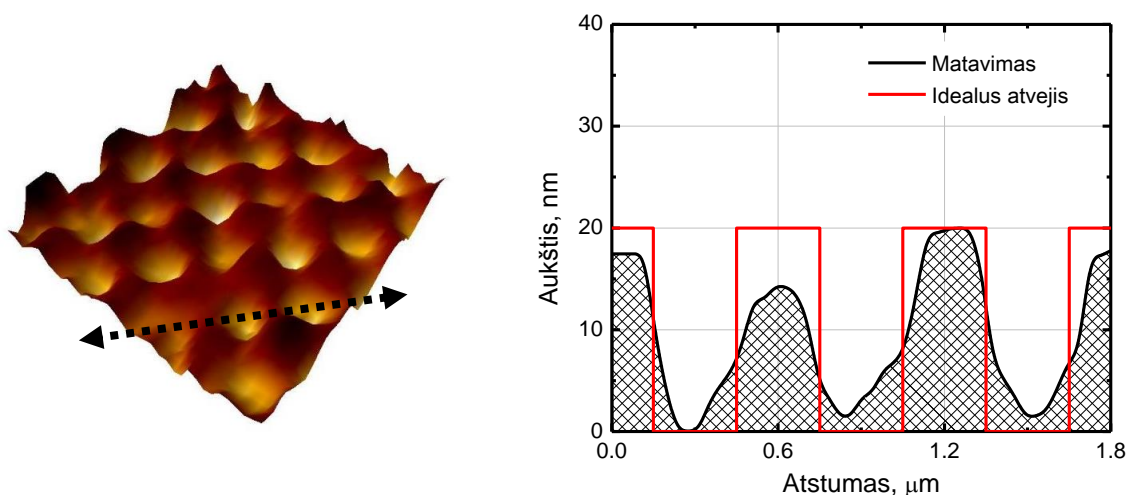
Prieš pradėdant analizuoti struktūrizavimo dėsningumus keičiant lazerio parametrus būtina suprasti, kas yra visas, o kas yra dėl interferencijos susidaręs struktūrinis periodinis pažeidimas. DLIP metodu pasiektos submikrometrinės struktūros yra tvarkingai išsidėsčiusios visame kelių šimtų mikrometrų diametro apskritimo formos pažeidimo plote (5.1 pav.).



5.1 pav. Interferencinis pažeidimas: viršuje visas vaizdas, apačioje priartintas vaizdas iš skirtingų pažeidimo vietų.

Optiniu mikroskopu, kurio maksimalus optinis didinimas – 100 kartų, galime matyti, ar struktūros susidaro, ar ne, o skenuojančiu elektronų mikroskopu, kuriuo didinimas gali siekti net iki 300000 kartų, panagrinėti ir detaliau. Pagal tai (5.1 pav.), matome, jog dideliame plote struktūros išlieka gan tolygios. Prie pažeidimo kraštų medžiaga yra lydoma, bet dėl per mažo intensyvumo gausinio pluošto kraštuose spinduliuotės energijos nepakanka, kad medžiaga būtų pašalinama – susiformuoja metalo salelės.

Skylių profilis gali būti nustatomas profilometru arba atominių jėgų mikroskopu (AFM). Tačiau dėl didelio tikslumo tik pastarasis variantas yra tinkamas nagrinėjant regimosios zonos apertūras, kuomet apertūrų ar kitų struktūrų storis siekia kelias dešimtis nanometrų, o periodas bei kiti matmenys neviršija šimtų nanometrų. Analizuojant struktūras AFM, procesas yra itin lėtas, tad negalime skenuoti viso mm^2 dalis ar net daugiau siekiančio pažeidimo, tenka pasirinkti konkrečias matavimų sritis (pavyzdžiui, kaip pateikta 5.1 pav.). Šiuo atveju buvo pasirinkta atsitiktinė zona centre (5.2 pav.).

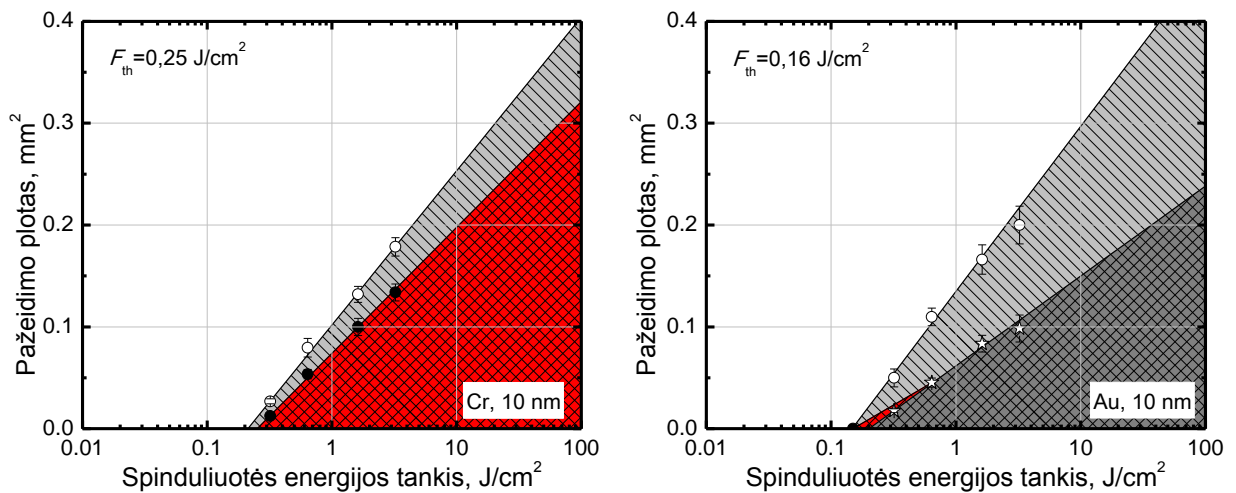


5.2 pav. Interferencinio pažeidimo vaizdas sudarytas AFM paviršiaus skenavimo metu (kairėje) ir atsitiktinės pažeidimo dalies skerspjūvis iš centrinės zonos (dešinėje). Matoma, kad periodas išlaikomas ties 600 nm, tačiau apertūrų kraštinės nėra idealios, pasižymi dideliu kūgiškumu.

Nustatyta, jog centrinėje dalyje susiformuoja tvarkinga periodinė struktūra, tačiau matomas gan didelis nukrypimas nuo idealios gardelės struktūros (5.2 pav. kairėje). Atkreipiant dėmesį į tai, praleidžiamos šviesos spektras gali būti įtakojamas šių netolygumų (teorinis spektro palyginimas didėjant kūgiškumui pateiktas 3.2.2 skyriuje). Kadangi, kaip pateikta modeliavimo rezultatuose, ne tik periodas, bet ir skylių dydis yra svarbūs faktoriai, todėl tokių apertūrų spektro juostos bus plačios. Spektriniuose matavimuose itin svarbus tikslus detektoriaus pozicionavimas – tikslus šviesos surinkimas iš centrinės pažeidimo dalies

5.2. Pažeidimų slenksčiai ir priklausomybė nuo impulsų skaičiaus

Tiesioginiu lazeriniu interferenciniu struktūrizavimu sukeliama itin smulkūs submikrometriniai pažeidimai. Taigi medžiagą veikiant lazerio spinduliuote, šiuo atveju yra sunku nustatyti, kada spinduliuotės energija yra pakankama medžiagos struktūriniam pakitimams inicijuoti - modifikuoti tiriamąją medžiagą. Dėl to lazerine interferencija veikdami plonasluoksnį metalo bandinį pakitimus dažniausiai matome tik medžiagai išsilydžius ar net išgaravus. Apertūrų formavime medžiagos pašalinimas yra būtinas, atitinkamai yra svarbu žinoti, kada spinduliuotės energija yra pakankama abliacijai įvykdyti. Pagal [70] pateiktą metodiką, buvo nustatyti abliacijos slenksčiai 10 nm storio chromo ir aukso dangose (5.3 pav.).



5.3 pav. DLIP abliacijos slenksčiai chromo ir aukso (ant chromo) atveju. Dangų storis – 10 nm. Languotas raudonas plotas žymi periodinių struktūrų formavimosi ribas, pilkas – spinduliuotės modifikuotą medžiagos plotą, o aukso atveju tamsiai pilkas (languotas) žymi ribas, kuomet dėl spinduliuotės poveikio aukso danga atplyšta nuo paviršiaus.

Remiantis literatūros apžvalgoje pateikta 1.55 lygtimi ir tuo, kad veikiama medžiaga yra plonas (d storio) metalo sluoksnis, lygtis buvo modifikuota teoriniam abliacijos slenksčio apskaičiavimui plonuose metalų sluoksniuose:

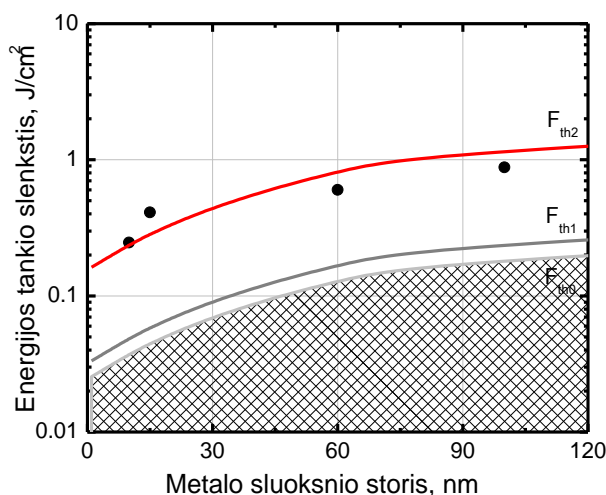
$$F_{th} = \frac{\rho(C_p T_m + q_m + q_v)L_{th}}{(1 - R)(1 - e^{-\alpha d})} \frac{d}{L_{th}}. \quad (5.1)$$

Pagal šią lygtį, didėjant metalo sluoksniui, abliacijos slenkstis taip pat auga. Be abejo itin svarbios yra ir medžiagos savybės. Skirtingų metalų sluoksnių palyginimai pateikti 5.1 lentelėje.

5.1. lentelė. Išmatuoti ir apskaičiuoti abliacijos slenksčiai skirtingiems metalų sluoksniams.

| | Skaičiavimo rezultatai | Matavimo rezultatai |
|------------|------------------------|------------------------|
| Au (10 nm) | 0,24 J/cm ² | 0,16 J/cm ² |
| Cr (10 nm) | 0,24 J/cm ² | 0,25 J/cm ² |
| Nb (20 nm) | 0,35 J/cm ² | 0,23 J/cm ² |

Apskaičiuota, jog norint išgarinti tam tikro storio sluoksnį reikia panašaus ar didesnio lazerio energijos tankio nei nustatyta matavimo metu. Pavyzdžiui 10 nm aukso atveju eksperimentiškai išmatuota, jog užtenka 0,16 J/cm² lazerio energijos tankio, kai teoriškai turėtų būti 0,24 J/cm². Toks nesutapimas gali būti sąlygotas to, kad dalis medžiagos yra pašalinama lydalo pavidalu metalo garų sudaromu slėgiu. Tam įtakos taip pat galėjo turėti neideali pažeidimo nustatymo metodika, nes optiniu mikroskopu negalime visiškai tiksliai nustatyti, ar submikrometrinėse zonose medžiaga yra pilnai pašalinta. Verta atkreipti dėmesį ir į galimą metalo sluoksnio netolygumą. Užfiksuotų ir apskaičiuotų pažeidimų slenksčių kitimas keičiantis metalo (šiuo atveju chromo) sluoksnio storiui palyginamas 5.4 paveiksle.



5.4 pav. Lazerio spinduliuotės energijos tankio slenkstinių verčių priklausomybė keičiant chromo dangos storį. Teoriškai apskaičiuoti modifikacijos, išlydimo ir abliacijos slenksčiai (F_{th0} , F_{th1} , F_{th2} linijos) ir palyginti su eksperimentiniais abliacijos slenksčio nustatymo rezultatais (taškai).

Periodinių subbanginių struktūrų formavimui svarbus proceso lankstumas. Efektyvaus lazerinio proceso parametrų ribos chromo atveju yra itin plačios: dėl geros adhezijos medžiaga neskylinėja ir neatitrūksta nuo padėklo, tad periodines struktūras galime formuoti dideliame plote. Tačiau chromo plazmoninių juostų intensyvumas regimajame diapazone yra itin mažas (žr. modeliavimo rezultatus). Taigi eksperimentų metu buvo svarbu pasirinkti tinkamo metalo

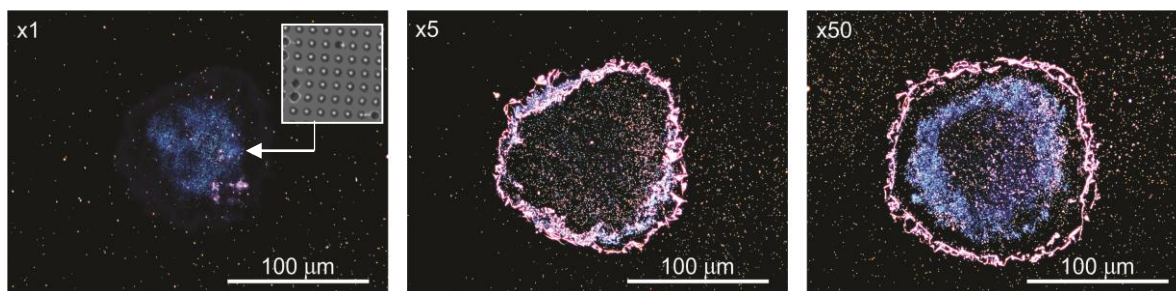
sluoksnį, kuris atitiktų abu kriterijus: matytumėme plazmonines juostas regimojoje šviesoje bei būtų galimas efektyvus periodinių apertūrų formavimas.

Nagrinęjant apertūrų formavimą aukso dangoje buvo pasirinkti įvairūs padėklai ir skirtingi adheziniai sluoksniai: auksas dengtas ant stiklo, safyro ir silicio padėklų, išbandyti titano (Ti), chromo (Cr) ir niobio (Nb) adheziniai sluoksniai. Pastebėta, kad veikiant medžiagą interferenciniu pluoštu, 10-60 nm aukso danga atkimba nuo padėklo apertūroms dar pilnai nesusiformavus (5.5 pav.). Po pirminių bandymų (be adhezinių sluoksnių) panaudoti 5 nm Cr ir Nb sluoksniai adhezijai padidinti, o rezultatams nepakitęs, išbandytas ir komercinis plonasluoksnis aukso bandinys su apytiksliai 2 nm storio Ti pasluoksniu, tačiau ir šiuo atveju gauti tokie pat neigiami rezultatai. Prisiminus abliacijos slenksčio priklausomybę nuo medžiagos savybių ir impulsų trukmės (1.55 lygtis), verta atkreipti dėmesį į lazerio spinduliuotės terminį poveikį. Tiksliau, naudojant interferenciją su 600 nm intensyvumo skartinio periodiškumu itin svarbus parametras tampa šiluminis difuzijos nuotolis, kuris pagal 1.56 lygtį apskaičiuotas ir pateiktas skirtingiems eksperimentų metu naudotiems metalams 5.2 lentelėje.

5.2. lentelė. Apskaičiuoti šiluminės difuzijos nuotoliai.

| | Šiluminės difuzijos nuotolis, nm |
|----|----------------------------------|
| Au | 276 |
| Cr | 130 |
| Nb | 118 |

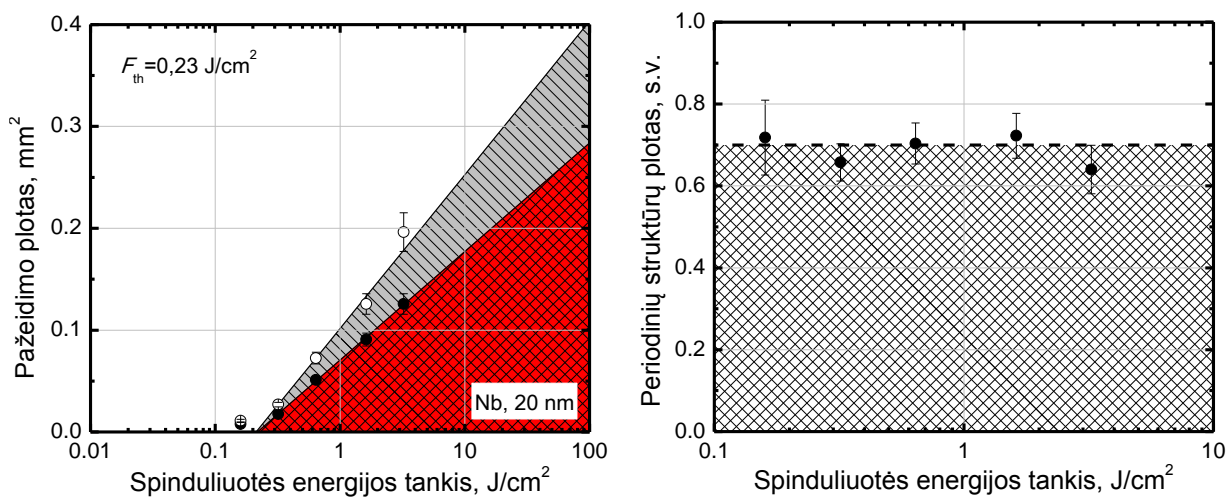
Taigi Au atveju interferencinio intensyvumo pasiskirstymo maksimalių verčių atžvilgiu įkaitinamos 276 nm diametro apskritimo formos zonos. Kadangi atstumas tarp šių intensyvumo maksimalių verčių yra tik 600 nm, visa gardelė yra šildoma beveik tolygiai, tad pasiekus tam tikrą temperatūrą dėl įtempių ir stebimas atkibimas nuo padėklo (5.5 pav.). Kitaip tariant, dėl šilumos perdavimo apertūros aukso dangoje 300 ps trukmės impulsų lazeriu negali būti formuojamos.



5.5 pav. Pažeidimas aukso dangoje didinant impulsų kiekį: iš kairės į dešinę: 1, 5 ir 50 impulsų atvejais.

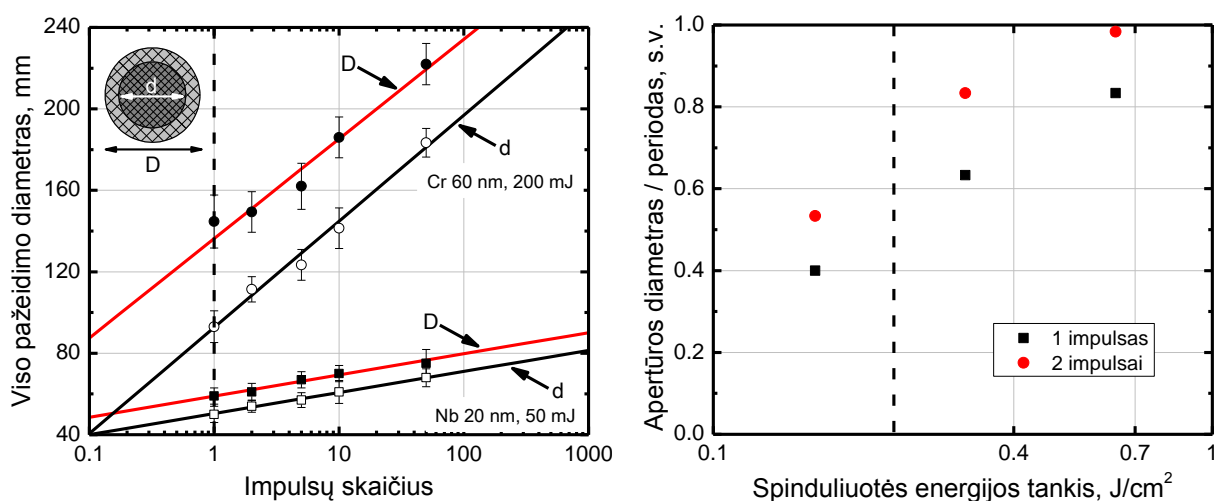
Lazerio impulso energija 50 μJ.

Eksperimentų metu alternatyva tapo niobis. Metalas, kurio optinės savybės nėra plačiai iširtos, tačiau literatūroje pastebima, jog šis metalas yra ne tik pasižymintis panašiomis terminėmis ir adhezijos savybėmis kaip chromas, tačiau ir plazmonų juostomis regimojoje zonoje [66]. Lazero spinduliuotės įtaka niobio sluoksnyje pateikta 5.6 paveiksle.



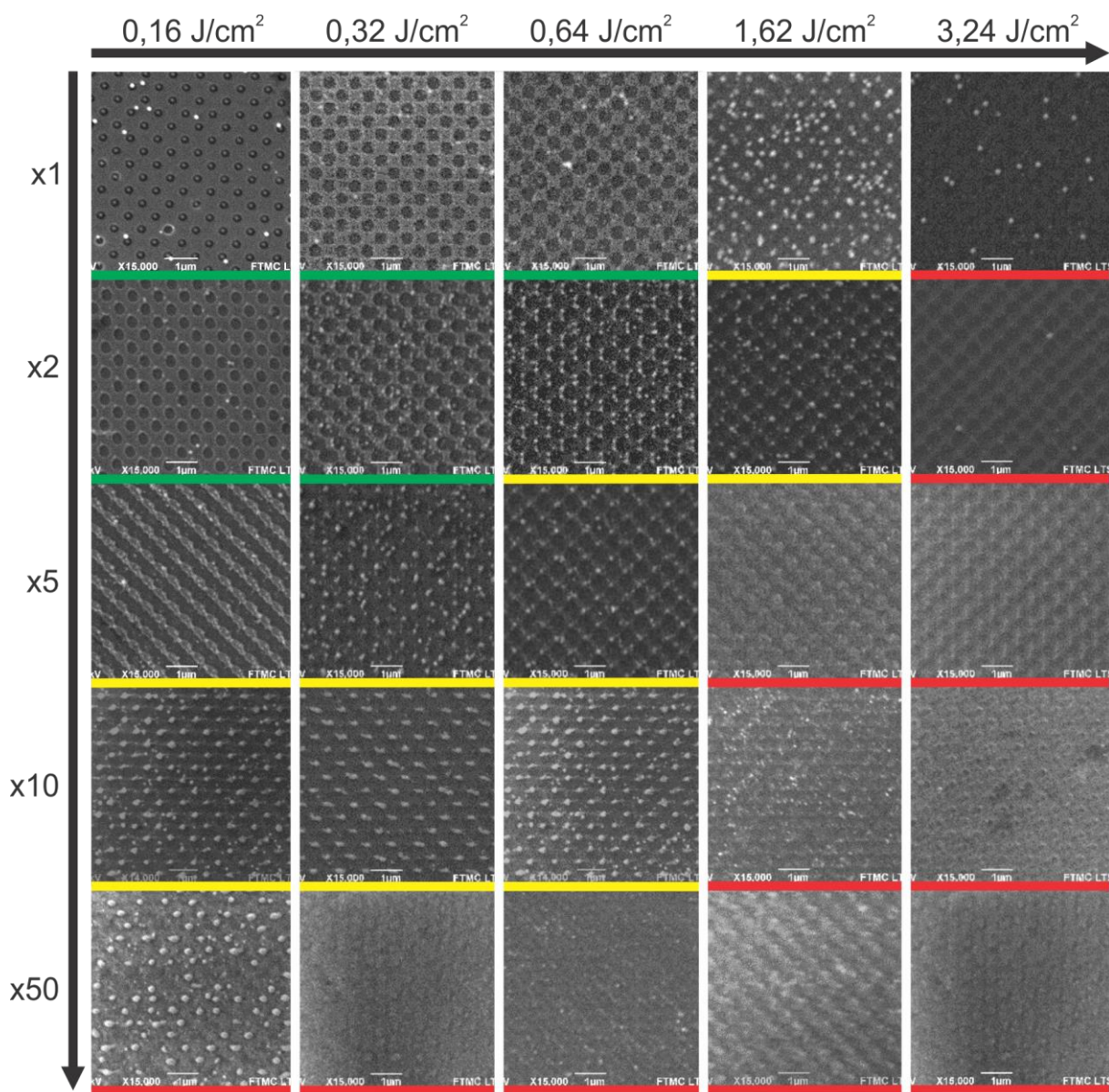
5.6 pav. DLIP abiacijos slenkstis niobio sluoksnio atveju (kairėje) ir struktūrų užimamas plotas viso modifikuoto paviršiaus ploto atžvilgiu (dešinėje).

Periodinės struktūros formuojamos dideliame plote – apytiksliai 70 % paveikto niobio paviršiaus (5.6 pav.). Tad atlikti eksperimentai keičiant lazerio spinduliuotės impulsų kiekį stengiantis užfiksuoti tinkamas sąlygas apertūrų formavimui jame. Verta pastebėti, kad bendro pažeidimo diametras priklauso nuo impulsų skaičiaus ne tiesiškai, o logaritmiškai (5.7 pav.).



5.7 pav. Bendro interferencinio pažeidimo dinamika augant impulsų skaičiui: pažeidimo dydis didinant impulsų kiekį auga logaritmiškai (kairėje) ir apertūros diametro santykis su periodu didėjant energijos tankiui ir keičiant impulsų kiekį (dešinėje).

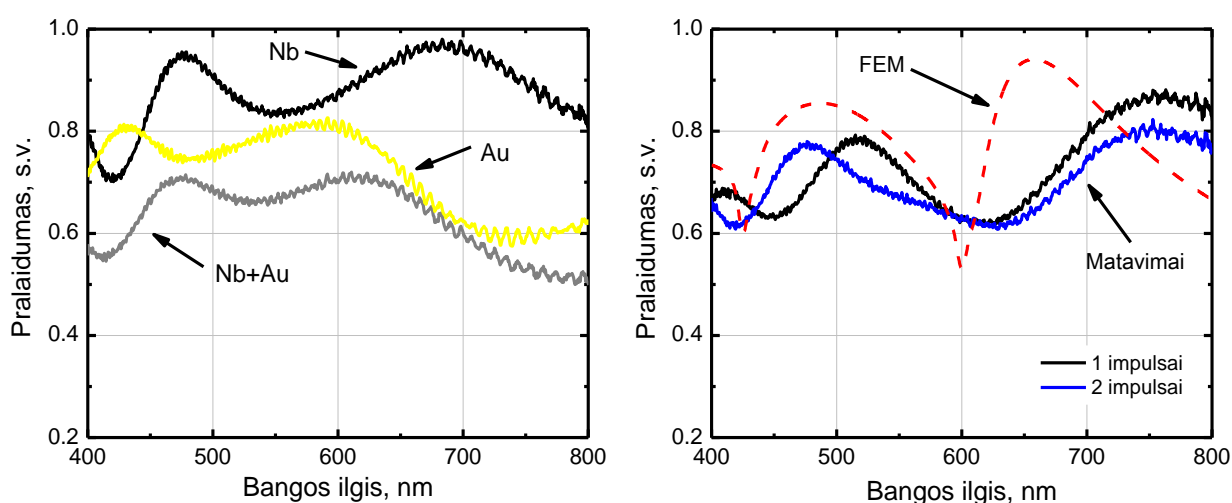
Vizualus struktūrų kitimas pavaizduotas 5.8 paveiksle pateiktuose SEM nuotraukose. Pažeidimai formuoti keičiant lazerio spinduliuotės energijos tankį ir impulsų skaičių. Nuotraukos fiksuotos iš interferencinio pluošto poveikio zonos centrinės dalies. Žaliai žymimi režimai, kuomet yra formuojamos taisyklingos formos periodinės apertūros, geltonai – dėl per didelio terminio poveikio formuojasi nebe apertūros, bet vis dar periodiniai netaisyklingos formos dariniai (10-100 nm metalo salelės), o raudonai žymimi režimai, kai lazerio spinduliuote veikiama medžiaga formuojasi į netvarkias struktūras, metalo sluoksnis pašalinamas ar net pažeidžiamas padėklas.



5.8 pav. Interferenciniai pažeidimai ant 20 nm Nb keičiant energijos tankį ir impulsų kiekį. Žalia spalva žymimi režimai, kuriais formuojamos periodinės apertūros, geltona – periodiniai dariniai, bet nebe apertūros, o raudona – visiškai pašalinamas sluoksnis.

5.3. Apertūrų pralaidumo matavimai

Subbanginių periodinių apertūrų pralaidumas matuotas 4.3 paveiksle pateikta optine sistema. Pralaidumo anomalijų neužfiksuota Cr atveju, nes šis metalas pasižymi plazmonų modomis infraraudonųjų spindulių zonoje. Aukso apertūrų pralaidumo spektras nebuvo išmatuotas dėl anksčiau minėto prasto periodinių struktūrų formavimosi metalo sluoksnyje. Taip pat neužfiksuotas aiškus spektro pokytis Nb atveju, esant 20 nm metalo sluoksniui, tačiau mažėjant sluoksniui, tai yra esant 5 nm Nb sluoksniui, plazmoninės modos stebimos ir pačiame sluoksnyje be struktūrų (5.9 pav., kairėje). Šviesai sklindant per periodines subbangines apertūras matomas spektro poslinkis link apertūrų periodo – 600 nm (5.9 pav., kairėje).



5.9 pav. Nb ir Au plonų sluoksnių pralaidumas (kairėje) ir per Nb sluoksnyje suformuotas 600 nm periodo subbangines apertūras (dešinėje).

Niobio 5 nm sluoksniu pralaidumo juostoje matoma minimali vertė ties apytiksliai 600 nm, kas atitinka difrakcinės gardelės apribojimą – *Wood* anomaliją. Spektras palygintas su baigtiniu elementų metodu (FEM) apskaičiuotu pralaidumu (5.9 pav.), kur taip pat matomas ši spektro minimali vertė, kaip ir spektrų panašumas juostų atžvilgiu. Ne visišką atitikimą sąlygoti gali tiek teorinis skaičiavimas, nes niobio optinės savybės nėra plačiai ištirtos ir pateiktos literatūroje, tiek naudotas pralaidumo matavimo metodas. Ateityje, nagrinėjant subbanginių periodinių apertūrų pritaikymą jutikliams, tikimasi pratęsti šių struktūrų analizę.

Pagrindiniai rezultatai ir išvados

COMSOL Multiphysics programinis paketas gali būti sėkmingai pritaikytas šviesos sklidimo per subbangines periodines struktūras modeliavimui:

- Sumodeliuotos subbanginės apertūros pasižymi sustiprintu optiniu pralaidumu (EOT). Duomenys tapatūs pateiktiems literatūroje.
- Nustatyta stipri EOT priklausomybė nuo pasirinkto metalo sluoksnio ir aplinkos savybių. Derindami tai, galime ne tik sudaryti sąlygas plazmoninei juostai norimoje vietoje, bet pagal juostų poslinkį tirti ir sąlytyje esančias medžiagas.
- Išnagrinėta apertūrų geometrinių dydžių ir formos įtaka pralaidumo spektrams. Didėjant apertūros skersmeniui charakteringosios juostos dėl bangolaidinio efekto slenkasi į ilgesniųjų bangų sritį, panašus, bet tiesinis kitimas matomas ir didėjant struktūrų periodui. Didėjant periodui ir sluoksnio storiui, fiksuojamas rezonansinis pralaidumas slopsta.

Panaudojant tiesioginį lazerinį interferencinį struktūrizavimą plonuose metalų sluoksniuose buvo sėkmingai suformuotos 600 nm periodines struktūros:

- Periodinės struktūros didelėje lazerio poveikio zonos dalyje išlieka tolygios, tačiau dėl gausinio intensyvumo skirstinio zonos kraštuose yra stebimas formos kitimas.
- Keisdami lazerio spinduliuotės intensyvumą ir impulsų kiekį galime kontroliuoti struktūrų formą ir jų dydį: nuo tvarkingų skylių iki netvarkingų struktūrų.
- Nustatytos efektyvaus lazerinio proceso parametrų ribos aukso, chromo ir niobio sluoksniuose. Dėl didelio terminio poveikio apertūrų formavimas aukso dangoje su 300 ps impulso trukmės lazeriu galimas tik labai siaurame diapazone nepriklausomai nuo adhezinio sluoksnio.
- Pralaidumo spektras išmatuotas suformavus 600 nm periodo apertūras 5 nm niobio sluoksnyje. Spektre aiškiai išskiriama *Wood* anomalija.

Rezultatai bus pritaikyti tolimesniems darbams: periodinių subbanginių apertūrų prietaikai jutiklių srityje.

Literatūros sąrašas

- [1] R. W. Wood, On a Remarkable Case of Uneven Distribution of Light in a Diffraction Grating Spectrum, In *Proc. Phys. Soc. London* **18**(1), 269-275, 1902.
- [2] H. A. Bethe, Theory of Diffraction By Small Holes, *Phys. Rev.* **66**(7-8), 163-182, 1944.
- [3] U. Fano, The Theory of Anomalous Diffraction Gratings and of Quasi-Stationary Waves on Metallic Surfaces (Sommerfeld's Waves), *J. Opt. Soc. Am.* **31**(3), 213-222, 1941.
- [4] T. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, A. P. Wolff, And T. Thio, Extraordinary Optical Transmission through Sub-Wavelength Hole Arrays, *Nature* **139**, 667-668, 1998.
- [5] H. F. Ghaemi, T. Thio, D. Grupp, T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, Surface Plasmons Enhance Optical Transmission Through Subwavelength Holes, *Phys. Rev. B* **58**(11), 6779-6782, 1998.
- [6] E. Popov, M. Neviere, S. Enoch, And R. Reinisch, Theory of Light Transmission Through Subwavelength Periodic Hole Arrays, *Phys. Rev. B* **62**(23), 16100-16108, 2000.
- [7] U. Schroter, D. Heitmann, Surface-Plasmon-Enhanced Transmission Through Metallic Gratings, *Phys. Rev. B* **58**(23), 15419-15421, 1998.
- [8] S. A. Maier, *Plasmonics: Fundamentals And Applications* (Springer, Bath, 2007).
- [9] W. L. Barnes, A. Dereux, T. Ebbesen, Surface Plasmon Subwavelength Optics, *Nature* **424**(6950), 824-830, 2003.
- [10] F. J. Garcia-Vidal, L. Martin-Moreno, T. W. Ebbesen, L. Kuipers, Light Passing Through Subwavelength Apertures, *Rev. Mod. Phys.* **82**(1), 729-787, 2010.
- [11] S. A. Maier, M. L. Brongersma, P. G. Kik, S. Meltzer, G. Requicha, B. E. Koel, H. A. Atwater, Plasmonics - a Route to Nanoscale Optical Devices, *Adv. Mater.* **15**(7-8), 562, 2003.
- [12] M. Beruete, M. Sorolla, I. Campillo, J. S. Dolado, L. Martin-Moreno, J. Bravo-Abad, F. J. Garcia-Vidal, Enhanced Millimeter Wave Transmission Through Quasioptical Subwavelength Perforated Plates, *Ieee Trans. Antennas Propag.* **53**(6), 1897-1903, 2005.
- [13] H. Cao, A. Nahata, Resonantly Enhanced Transmission of Terahertz Radiation Through a Periodic Array of Subwavelength Apertures, *Opt. Express*, **12**(6), 1004-1010, 2004.
- [14] J. V. Coe, J. M. Heer, S. Teeters-Kennedy, H. Tian, K. R. Rodriguez, Extraordinary Transmission of Metal Films with Arrays of Subwavelength Holes," *Annu. Rev. Phys. Chem.* **59**(1), 179-202, 2008.
- [15] H. Rigneault, J. Capoulade, J. Dintinger, J. Wenger, N. Bonod, E. Popov, T. Ebbesen, P.-F. Lenne, Enhancement of Single-Molecule Fluorescence Detection in Subwavelength Apertures, *Phys. Rev. Lett.* **95**(11), 117401, 2005.

- [16] D. Gérard, J. Wenger, N. Bonod, E. Popov, H. Rigneault, F. Mahdavi, S. Blair, J. Dintinger, T. W. Ebbesen, Nanoaperture-Enhanced Fluorescence: Towards Higher Detection Rates with Plasmonic Metals,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.* **77**, 1-8, 2008.
- [17] E. Popov, M. Nevière, J. Wenger, P.-F. Lenne, H. Rigneault, P. Chaumet, N. Bonod, J. Dintinger, T. Ebbesen, Field Enhancement in Single Subwavelength Apertures., *J. Opt. Soc.* **23**(9), 2342-2348, 2006.
- [18] R. Gordon, D. Sinton, K. L. Kavanagh, And A. G. Brolo, A New Generation of Sensors Based on Extraordinary Optical Transmission, *Acc. Chem. Res.* **41**(8), 1049-1057, 2008.
- [19] P. Zilio, *Mechanisms of Surface Plasmon Polariton Propagation for Nano-Optics Applications* (University Of Padova, 2012).
- [20] S. T. Seiler, I. S. Rich, N. C. Lindquist, Direct Spectral Imaging of Plasmonic Nanohole Arrays for Real-time Sensing, *Nanotechnology* **27**(18), 184001, 2016.
- [21] N. C. Lindquist, *Engineering Metallic Nanostructures for Surface Plasmon Resonance Sensing* (University of Minnesota, 2010).
- [22] B. Voisiat, *Formation of Frequency Selective Surfaces Using Laser Ablation Methods and Characterisation of Their Properties* (Vilnius University, Vilnius, 2015).
- [23] S. Indrišiūnas, B. Voisiat, A. Žukauskas, G. Račiukaitis, Direct Laser Beam Interference Patterning Technique for Fast High Aspect Ratio Surface Structuring, *Proc. of SPIE 9350*, 1-7, 2015.
- [24] S. Indrišiūnas, B. Voisiat, G. Račiukaitis, Fabrication of Micro-size Structures Using Scanned Interference Pattern, *Physics Procedia* **41**, 727–733, 2013.
- [25] J. C. Maxwell, *P. Trans. R. S. Lond*, A Dynamical Theory of The Electromagnetic Field, *Phil. Trans. R. Soc.* **155**, 459-512, 1865.
- [26] A. Dubietis, *Netiesinė optika* (Vilniaus Universitetas, Vilnius, 2011).
- [27] A. P. Stabinis, G. Valiulis, *Ultratrumpųjų šviesos impulsų netiesinė optika* (Vilniaus Universitetas, Vilnius, 2008).
- [28] M. Ordal, L. Long, R. Bell, S. Bell, R. Bell, R. Alexander, C. Ward, Optical Properties of The Metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in The Infrared And Far Infrared, *Appl. Opt.* **22**(7), 1099-1020, 1983.
- [29] P. B. Johnson, R. W. Christy, Optical Constants of The Noble Metals, *Physical Review B*, **6**(12), 4370-4379, 1972.
- [30] D. Barchiesi, T. Grosjes, Fitting The Optical Constants of Gold, Silver, Chromium, Titanium, and Aluminum in The Visible Bandwidth, *J. Nanophotonics* **8**(5), 083-097, 2014.
- [31] K. M. Mcpeak, S. V. Jayanti, S. J. P. Kress, S. Meyer, S. Iotti, A. Rossinelli, D. J. Norris, Plasmonic Films Can Easily Be Better: Rules and Recipes, *Acs Photonics* **2**(3), 326-333,

- 2015.
- [32] P. R. West, S. Ishii, G. Naik, N. Emani, V. M. Shalae, A. Boltasseva, Searching for Better Plasmonic Materials, *Laser Photon. Rev.* **4**, 795–808, 2010.
 - [33] A. D. Rakic, A. B. Djurisić, J. M. Elazar, M. L. Majewski, A. B. Djurišić, J. M. Elazar, M. L. Majewski, Optical Properties of Metallic Films for Vertical-Cavity Optoelectronic Devices, *Appl. Opt.* **37**(22), 52-71, 1998.
 - [34] C. L. C. Smith, N. Stenger, A. Kristensen, N. A. Mortensen, S. I. Bozhevolnyi, Gap and Channeled Plasmons in Tapered Grooves: a Review, *Nanoscale* **7**(21), 9355-86, 2015.
 - [35] H. Raether, *Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings* (Springer, Berlin, 1988).
 - [36] C. Genet, T. W. Ebbesen, Light in Tiny Holes, *Nature* **445**(7123), 39-46, 2007.
 - [37] T. Thio, H. Lezec, T. Ebbesen, Strongly Enhanced Optical Transmission Through Subwavelength Holes in Metal Films, *Phys. B Condens. Matter* **279**(1-3), 90–93, 2000.
 - [38] L. Martín-Moreno, F. J. García-Vidal, H. J. Lezec, A. Degiron, T. W. Ebbesen, Theory of Highly Directional Emission from a Single Subwavelength Aperture Surrounded by Surface Corrugations, *Phys. Rev. Lett.* **90**(16), 167401, 2003.
 - [39] J. M. Yi, A. Cuche, F. De León-Pérez, A. Degiron, E. Laux, E. Devaux, C. Genet, J. Alegret, L. Martín-Moreno, T. W. Ebbesen, Diffraction Regimes of Single Holes, *Phys. Rev. Lett.*, **109**(2), 1-5, 2012.
 - [40] T. J. Kim, T. Thio, T. W. Ebbesen, D. E. Grupp, H. J. Lezec, Control of Optical Transmission Through Metals Perforated with Subwavelength Hole Arrays, *Opt. Lett.* **24**(4), 256-258, 1999.
 - [41] F. Przybilla, A. Degiron, C. Genet, T. Ebbesen, F. De León-Pérez, J. Bravo-Abad, F. J. García-Vidal, L. Martín-Moreno, Efficiency and Finite Size Effects in Enhanced Transmission Through Subwavelength Apertures, *Opt. Express* **16**(13), 9571-9579, 2008.
 - [42] B. Stein, J. Y. Laluet, E. Devaux, C. Genet, T. W. Ebbesen, Surface Plasmon Mode Steering and Negative Refraction, *Phys. Rev. Lett.*, **105**(26), 266804, 2010.
 - [43] J. Dintinger, A. Degiron, T. W. Ebbesen, Enhanced Light Transmission Through Subwavelength Holes, **30**, 381-384, 2005.
 - [44] A. Degiron, H. J. Lezec, N. Yamamoto, T. W. Ebbesen, Optical Transmission Properties of a Single Subwavelength Aperture in a Real Metal, *Opt. Commun.*, **239**, 61-66, 2004.
 - [45] T. Xu, *Nonlinear Optical Study of Metallic Subwavelength Hole Arrays* (University of Utah, 2012).
 - [46] N. C. Lindquist, P. Nagpal, K. M. Mcpeak, D. J. Norris, S. Oh, Engineering metallic nanostructures for plasmonics and nanophotonics, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 61, 2012.

- [47] A. Lasagni, D. Benke, T. Kunze, M. Bieda, S. Eckhardt, T. Roch, D. Langheinrich, J. Berger, Bringing the Direct Laser Interference Patterning Method to Industry: a One Tool-Complete Solution for Surface Functionalization, *JMLN* **10**, 1–5, 2015.
- [48] A. Fallis, *Laser Surface Engineering: Processes and Applications* (Woodhead Publishing, Cambridge, 2013).
- [49] Y. Nakata, T. Hiromoto, N. Miyanaga, Mesoscopic Nanomaterials Generated by Interfering Femtosecond Laser Processing, *Appl. Phys. A* **101**, 471-474, 2010.
- [50] T. Roch, D. Langheinrich, Direct Fabrication of Periodic Structures on Surfaces Laser Interference Patterning as New Scalable, *Laser Micro Proc.*, 45-48, 2011.
- [51] H. Misawa, S. Juodkazis, *3D Laser Microfabrication. Principles and Applications* (Wiley Weinheim, 2006).
- [52] E. Matthias, M. Reichling, J. Siegel, O. W. Kading, S. Petzoldt, H. Skurk, P. Bizenberger, E. Neske, The Influence of Thermal-Diffusion on Laser-Ablation of Metal-Films, *Appl. Phys. a-Materials Sci. Process* **58**(2), 129–136, 1994.
- [53] F. Korte, J. Serbin, J. Koch, A. Egbert, C. Fallnich, A. Ostendorf, B.N. Chichkov, Towards Nanostructuring with Femtosecond Laser Pulses, *Appl. Phys. A* **77**, 229–235 (2003).
- [54] J. Koch, F. Korte, C. Fallnich, A. Ostendorf, B.N. Chichkov, Direct-write Subwavelength Structuring with Femtosecond Laser Pulses, *Optical Engineering* **44**(5), 051103, 2005.
- [55] U. S. Dixit, *Finite Element Method: An Introduction* (Indian Institute of Technology, Guwahati, 2005)
- [56] E. Barkanov, *Introduction To The Finite Element Method* (RTU, Riga, 2004).
- [57] G. Nikishkov, *Introduction To The Finite Element Method* (Japan Univ. Aizu, Wakamatsu, 2004).
- [58] C. S. Desai, T. Kundu, *Introductory Finite Element Method* (Crc Press, 2001).
- [59] P. G. Hermannsson, *Simulations of Long-Range Surface Plasmon Polariton Waveguides and Devices* (University Of Iceland, Iceland, 2009).
- [60] J. Berzinš, *Keramiku pjaustymo lazerio spinduliuote tyrimas* (Vilniaus Universitetas, Vilnius, 2015).
- [61] B. Dold, R. Mecke, Optische Eigenschaften Von Edelmetallen, Übergangsmetallen Und Deren Legierungen Im Infrarot Optik, *Optik* **22**, 435-446, 1965.
- [62] P. Winsemius, H. P. Langkeed, F. Van Kampen, Structure Dependence of The Optical Properties of Cu, Ag and Au, *Physica* **79b**, 529-546, 1975.
- [63] G. Lynch, C. G. Leveque, D. W. Olson, Reflectance Spectra and Dielectric Functions of Ag in The Region of Interband Transitions, *Phys. Rev. B* **27**, 4654-4660, 1983.
- [64] F. Garcia De Abajo, J. Saenz, Electromagnetic Surface Modes in Structured Perfect-

- Conductor Surfaces, *Phys. Rev. Lett.* **95**(23), 1-4, 2005.
- [65] S. Indrišiūnas, B. Voisiat, M. Gedvilas, G. Račiukaitis, Two Complementary Ways of Thin-metal-film Patterning Using Laser Beam Interference and Direct Ablation, *J. Micromech. Microeng.* **23**, 1-9, 2013
- [66] T. Wieduwilt, A. Tuniz, S. Linzen, S. Goerke, J. Dellith, U. Hübner, M. A. Schmidt, Ultrathin Niobium Nanofilms on Fiber Optical Tapers – a New Route Towards Low-loss Hybrid Plasmonic Modes, *Sci. Rep.* **5**, 17060, 2015.
- [67] P. Benjamin, C. Weaver, The Adhesion of Evaporated Metal Films on Glass, *Proc. R. Soc. Lond. A* **261**, 516-531, 1961.
- [68] W. Callister, D. Rethwisch, *Materials Science and Engineering: an Introduction* (John Wiley & Sons, USA, 2017)
- [69] M. Thoreson, Z. Liu, U. Chettiar, P. Nyga, *Studies on Metal-Dielectric Plasmonic Structures* (Sandia, Albuquerque, 2010)
- [70] J. M. Liu, Simple Technique for Measurements of Pulsed Gaussian-beam Spot Sizes, *Opt. Lett.* **7**(5), 196–198, 1982.

Santrauka

ŠVIESOS SKLIDIMO PER PERIODINES SUBBANGINES APERTŪRAS TYRIMAS

Jonas Berzinš

Šviesos sklidimas per apertūras, mažesnes nei elektromagnetinės spinduliuotės bangos ilgis, dėl daugybės potencialių pritaikymų yra intensyvus tyrimų objektas. Metalu sluoksnyje periodiškai suformavus struktūras pasiekiamas sustiprintas optinis pralaidumas (EOT). Fizinių ir technologijos mokslų centre naudojamos technologijos, kuriomis galima suformuoti tokias subbangines apertūras, o taip pat sudarytas teorinis pagrindas specifinių struktūrų formavimui.

EOT pirmą kartą pademonstruotas ir požiūris į subbangines apertūras pakeistas 1998 m. Pagrindinis EOT paaiškinantis mechanizmas – metalo ir dielektriko terpių sandūroje sklindanti banga, vadinama paviršiaus plazmonų poliaritonu. Ši banga atsiranda dėl elektromagnetinės spinduliuotės sąryšio su kolektyvinėmis metalo išorinio sluoksnio elektronų osciliacijomis.

Plazmonų, taigi ir EOT, modeliavimas yra kritiškai susijęs su teisingu ribinių sąlygų ir medžiagos savybių nustatymu, elektromagnetinės spinduliuotės sklidimo aprašymu. Modeliavimui naudotas *COMSOL Multiphysics* programinis paketas - interaktyvi vartotojo sąsaja, skirta dalinių išvestinių diferencialinių lygčių sprendimui. Vienas iš pagrindinių šio darbo tikslų atitinkamai sietas su šio programinio paketo pritaikymu plazmoninių struktūrų modeliavimui. Darbo rezultatai pasiekti atliekant skaičiavimus baigtiniu elementų metodu, vykdant dielektrinės skvarbos funkcijos optimizavimo bei įvairių subbanginių metalinių apertūrų modeliavimo užduotis orientuojantis į regimąjį šviesos diapazoną. Nagrinėta priklausomybė nuo pasirinktos medžiagos, įvairių apertūros parametrų, periodinio išsidėstymo, dydžio ir formos, spinduliuotės kritimo kampo bei metalines apertūras supančios aplinkos.

Pasinaudojant pikosekundiniu (300 ps) lazeriu atliktas eksperimentinis periodinių struktūrų formavimas. Tiesioginiu interferenciniu lazeriniu struktūrizavimu (DLIP) formuotos 600 nm periodo struktūros plonuose metalų sluoksniuose. Pasirinkti skirtingi chromo, aukso ir niobio ploni metalų sluoksniai. Ištirta pažeidimų topologija bei priklausomybė nuo lazerio parametrų: impulsų energijos ir pasikartojimų skaičiaus, optimizuojant lazerių proceso efektyvumą.

Modeliavimo rezultatai puikiai palyginami su įvairiuose publikacijose pateiktais eksperimentiniais matavimais, tad *COMSOL Multiphysics* programinis paketas gali būti pritaikytas šviesos sklidimo per subbangines periodines struktūras modeliavimui. Eksperimentų metu suformuotos subbanginės struktūros, kurios bus ir toliau tiriamos galimoms jutiklių prietaikoms.

Summary

INVESTIGATION OF LIGHT PROPAGATION THROUGH PERIODIC SUB-WAVELENGTH APERTURES

Jonas Berzinš

Light propagation through apertures of a smaller size than the wavelength of electromagnetic wave has huge potential in future applications and has been intensively researched. In such periodically formed metallic structures a phenomena called enhanced optical transmission (EOT) can be observed. Center for Physical Sciences and Technologies has the technologies for the structuring of such apertures, together with their further development, theoretical basis in order to form specific structures was built.

The first demonstration and a new view of sub-wavelength apertures emerged in 1998. Main explanation for EOT is surface plasmon polaritons, a wave propagating in the interface of dielectric and metal. This wave is due to the coupling of electromagnetic wave to oscillations of the free electrons, so called plasmons.

Modelling of plasmons and EOT is critically connected to a proper setting of boundary conditions, properties of materials and description of propagating electromagnetic wave. For carrying out the modelling we used COMSOL Multiphysics program package, which is an interactive user interface for solving of partial differential equations. One of the goals of this work was adjusted to applying COMSOL Multiphysics for the above mentioned problem. Calculations of finite element method was used in parallel to optimisation of dielectric function and other modelling objectives. The transmission of periodic apertures was investigated mostly in the visible region. We observed EOT dependences on chosen material, periodic arrangement, size and form, the angle of incidence and surrounding environment.

Picosecond laser (300 ps) was used to form the sub-wavelength periodic structures experimentally. The structures of 600 nm period were formed by using the method of Direct Laser Interference Patterning (DLIP). Different metal thin-films were investigated: chromium, gold and niobium. The study of topology as well as dependence on laser parameters: pulse energy and number of pulses, was carried out in order to optimise the effectiveness of laser processing.

Results are comparable to the experimental data from various publications. Basing on this, we can state that COMSOL Multiphysics program package can be successfully used for the modelling of light propagation through periodic sub-wavelength apertures. The experiments also proved that we are capable of structuring such apertures. Current results will be transferred to the further analysis of sensing applications.